



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

**PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO MODELO DE HEISENBERG
NAS APROXIMAÇÕES DE CAMPO MÉDIO E EFETIVO**

por

Adelino dos Santos Filho

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque (Orientador - UFS)
Prof. Dr. Nelson Orlando Moreno Salazar (UFS)
Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza (UFS)
Prof. Dr. João Antônio Plascak (UFPB)
Prof. Dr. Ricardo Oliveira Freire (UFS)

São Cristóvão - SE, Brasil
Agosto - 2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Núcleo de Pós-Graduação em Física

***“Propriedades magnéticas do modelo de
Heisemberg nas aproximações de campo médio e
efetivo”***

por

Adelino dos Santos Filho

Tese de doutorado **APROVADA** em sessão pública no dia trinta de agosto do ano dois mil e dezesseis perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:



Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque
(DMA-UFS)



Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza
(DFI-UFS)



Prof. Dr. Nelson Orlando Moreno Salazar
(DFI-UFS)



Prof. Dr. Ricardo Oliveira Freire
(DQI-UFS)



Prof. Dr. João Antonio Plascak
(DFIS-UFPB)

A meus pais, Adelino dos Santos e Cenira Siqueira Cruz
e a minha irmã Alexsandra.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a DEUS, pelas infinitas dádivas concedidas a mim, inclusive a da conclusão do doutorado que envolveu uma grande rede logística composta de várias partes como:

a presença fundamental dos meus pais, Adelino dos Santos e Cenira Siqueira Cruz Santos e da minha irmã Alexsandra Siqueira Santos .

Agradeço ao prof. Dr. Douglas F. De Albuquerque por me aceitar como aluno em seu grupo de pesquisa, possibilitando assim, acesso aos meios acadêmicos para realizar o meu doutoramento.

Agradeço ao prof. Dr. Nelson Orlando Moreno Salazar pela coorientação que foi de crucial importância para a conclusão do trabalho.

Agradeço ao prof. Dr. João Batista dos Santos Filho por ter sido um grande colaborador na publicação do artigo.

Agradeço ao prof. Dr. Augusto dos Santos Freitas por ter proposto o trabalho da qualificação do doutorado, o qual constitui uma parte muito importante dos conteúdos desenvolvidos em todo processo.

Agradeço ao prof. Dr. João Antônio Plascak pela atenção dada ao meu trabalho e consequentemente pela importante contribuição ao mesmo.

Agradeço ao prof. Dr. André Maurício Conceição de Sousa e ao prof. Dr. Francisco Assis Góis de Almeida pelas inúmeras orientações e discussões físicas pertinentes ao trabalho do doutorado.

Agradeço ao Prof. Dr. Gerson Cortes Duarte Filho pelo suporte computacional.

Agradeço ao Prof. Msc. José Anselmo pelo auxílio na formatação do texto da tese.

Agradeço aos meus queridos alunos que sempre me colocavam para cima em todos os momentos dessa caminhada, agradeço a confiança e o auxílio da minha amiga Adriana Ventura pela ajuda na reta final da escrita da tese.

Por todos esses auxílios citados e pelos que não são possíveis de citar aqui, é que te agradeço meu bom DEUS.

“Desistir ... eu já pensei seriamente nisso, mas nunca me levei realmente a sério; é que tem mais chão nos meus olhos do que o cansaço nas minhas pernas, mais esperança nos meus passos, do que tristeza nos meus ombros, mais estrada no meu coração do que medo na minha cabeça.”

CORA CORALINA

RESUMO

O magnetismo exibido pelos materiais tem como um dos requisitos físicos o ordenamento dos seus íons magnéticos que ocorre por meio de uma interação denominada de interação de troca de origem eletrostática. Muitos outros fatores influenciam fortemente no surgimento do magnetismo como a geometria da rede, presença de íons não magnéticos no cristal, presença de anisotropia, fatores externos ao material, como campos aplicados ao mesmo. Neste trabalho, obtivemos propriedades magnéticas do modelo de Heisenberg ferromagnético de spin $1/2$ nas aproximações de campo médio, e de campo efetivo via operador diferencial em duas redes distintas: kagomé e cúbica simples. Para a rede tipo kagomé, a aproximação utilizada foi a de campo médio e adicionamos os termos de anisotropia de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) e de campo externo. Nessa parte foi analisado o diagrama de fases no plano Temperatura versus interação (DM) e o comportamento das grandezas termodinâmicas como magnetização e susceptibilidade magnética sob a flutuação dos parâmetros Δ (definido como parâmetro de troca), do termo de anisotropia (DM) e da temperatura. Para a rede cúbica simples, a abordagem foi realizada na aproximação de campo efetivo por meio da técnica do operador diferencial. Nesse contexto, adicionamos ao formalismo um termo de distribuição das ligações e uma distribuição trimodal para o campo externo e estudamos os efeitos dessas distribuições nos diagramas de fases temperatura versus campo externo e temperatura versus ligação. Com isso, obtivemos resultados que podemos considerá-los como uma boa estimativa do comportamento magnético de sistemas reais, ao quais possuem os tipos de redes considerados e que estão sob a influência dos parâmetros anisotrópicos e das distribuições consideradas.

Palavras-chave: Magnetismo, diagrama de fase, termo anisotropia, função de distribuição, modelo de Heisenberg.

ABSTRACT

The magnetic properties of materials are primarily dictated by its ion ordering which occurs by means of electrostatic exchange interaction. Many other factors are also involved such as the lattice geometry, non-magnetic ions, anisotropy, external fields, and so forth. In this work, we investigate the ferromagnetic spin $1/2$ Heisenberg model within the mean field approximation as well as in the effective field framework in two distinct structures, namely, the kagome and simple cubic lattices. For the kagome structure, we applied the mean field approximation including Dzyaloshinskii-Moriya (DM) anisotropy and an external field. Then, we worked out its phase diagram on the temperature-interaction manifold and analyzed some fundamental thermodynamics properties such as magnetization and magnetic susceptibility for varying Δ (exchange interaction parameter), anisotropy (DM), and temperature. For the simple cubic lattice, we rely on the effective-field approximation by means of the differential operator technique. In this case, we assumed the external field to follow a trimodal distribution and also added a term that accounts for the bond distribution. We then explored the resulting behavior of the phase diagrams. Our findings provide an accurate description of the magnetic behavior of real systems featuring anisotropy and similar topologies.

Keywords: Magnetism, phase diagram, term anisotropy, distribution function, Heisenberg model.

SUMÁRIO

Capítulo 1—Introdução	12
Capítulo 2—Fundamentação Teórica	14
2.1 Modelo	14
2.2 Relações da Mecânica Estatística com a Termodinâmica	15
2.3 Campo Medio	16
2.4 Campo Efetivo	17
2.5 Transição de Fase	23
2.6 Interação Dzyaloshinsky-Moriya (DM)	24
Capítulo 3—Trabalhos de Fundamentação	26
3.1 Modelo de Heisenberg na Aproximação de Campo Médio	26
3.2 Modelo de Heisenberg na Aproximação de Campo Efetivo	28
Capítulo 4—Resultados e Discussões	30
4.1 Modelo de Heisenberg com interação (DM) rede Kagomé	30
4.1.1 Magnetização	33
4.1.2 Diagrama de Fase $T_c \times d_0$	35
4.1.3 Susceptibilidade Magnética	36
4.2 Campo efetivo técnica do operador diferencial	37
4.2.1 Diagramas de fases $k_B T_c / J \times h$ e $k_B T_c / J \times \alpha$	41
Capítulo 5—Conclusões e Perspectivas	46
Apêndice A—Identidade de Callen	52

	8
Apêndice B—Operador Diferencial Exponencial	55
Apêndice C—Magnetização	59
Apêndice D— Coeficientes da Expansão	61
Apêndice E—Trabalho Publicado	63

LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema que representa um sistema com N sitios interagentes.	17
2.2	Cluster com um íon.	19
2.3	Cluster com dois íons.	19
2.4	Variação da energia livre de Landau com a magnetização para valores decrescentes de a_2 . Referência[18].	24
4.1	Rede Kagomé.	30
4.2	Cluster da rede kagomé.	31
4.3	Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$).	34
4.4	Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Heisenberg anisotrópico ($\Delta = 0, 6$).	34
4.5	Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Ising ($\Delta = 1$).	35
4.6	Diagrama de fase $T \times d$ para $q = 4$ e $\Delta = 0, 0.3, 0.6$ e 1	36
4.7	Susceptibilidade magnética em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, do modelo Ising.	37
4.8	Rede cúbica simples contendo dois spins no cluster.	38
4.9	Diagrama de fases no plano $k_B T_c/J \times h$. Para $(a)p = 0, 0, (b)p = 0, 1, (c)p = 0, 2, (d)p = 0, 3, (e)p = 0, 4, (f)p = 0, 5, (g)p = 0, 6, (h)p = 0, 7, (i)p = 0, 8, (j)p = 0, 9$. Para $\alpha = 0$	42
4.10	Refinamento $\alpha = 0$	42
4.11	Diagrama de fases no plano $k_B T_c/J \times h$. Para $(a)p = 0, 0, (b)p = 0, 1, (c)p = 0, 2, (d)p = 0, 3, (e)p = 0, 4, (f)p = 0, 5, (g)p = 0, 6, (h)p = 0, 7, (i)p = 0, 8, (j)p = 0, 9$. Para $\alpha = 0, 5$	43
4.12	Refinamento $\alpha = 0, 5$	43
4.13	Diagrama de fases no plano $k_B T_c/J \times h$. Para $(a)p = 0, 0, (b)p = 0, 1, (c)p = 0, 2, (d)p = 0, 3, (e)p = 0, 4, (f)p = 0, 5, (g)p = 0, 6, (h)p = 0, 7, (i)p = 0, 8, (j)p = 0, 9$. Para $\alpha = 1$	44

<i>LISTA DE FIGURAS</i>	10
4.14 Refinamento $\alpha = 1$	44
4.15 Diagrama de fase no plano $k_B T_c / J \times \alpha$. Para $(a)h = 3, 5$, $(b)h = 3, 0$, $(c)h = 2, 5$, $(d)h = 2, 0$, $(e)h = 1, 5$, $(f)h = 1$	45
A.1 Rede unidimensional.	52
C.1 Magnetização rede unidimensional.	59

LISTA DE TABELAS

2.1	Variáveis termodinâmicas para sistemas magnéticos.	16
4.1	Localização dos pontos tricríticos T_t , h_t para valores selecionados de p e α	41

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A percepção dos fenômenos magnéticos ainda se deu na antiguidade [1], e desde então, aplicações de grande importância vêm sendo implementadas em atividades humanas utilizando manifestações magnéticas da matéria. Para exemplificar, podemos citar inicialmente a bússola, importante instrumento de orientação que foi essencial nas grandes navegações, contribuindo para o fortalecimento do comércio da época. Outras aplicações tão expressivas como essa, em outras áreas, só foram possíveis com os estudos de cunho científico sobre o magnetismo, como a geração de energia elétrica através da indução, que foi descrita por Faraday no século XIX.

Com o advento da teoria quântica no início do século XX [2], o entendimento do comportamento em escala atômica dos constituintes dos diversos materiais tornou possível explicar como o magnetismo em suas diversas formas é gerado na matéria, pois o referido fenômeno é essencialmente quântico e perceptível em escala macroscópica. Áreas da física como Termodinâmica e Mecânica Estatística [3], também somam grandes e valiosas contribuições em pesquisas sobre magnetismo, pois esses campos do conhecimento físico fornecem mais "ferramentas" que se somam às da quântica para a análise das características magnéticas de um dado material.

Dentre os possíveis fatores que podem influenciar o comportamento magnético de um sistema, podemos citar a agitação térmica, aspectos geométricos da rede cristalina, presença de íons não magnéticos no cristal e aplicação de campos externos. Fazendo uso desses conhecimentos, realizamos um estudo do modelo de Heisenberg ferromagnético de spin 1/2 para dois sistemas distintos. Na primeira abordagem analisamos a rede tipo kagomé adicionando ao hamiltoniano os termos anisotrópicos de troca (Δ) e o de Dzyaloshinsky-Moriya (DM), na aproximação de campo médio. Sistemas magnéticos desse tipo apresentam frustração geométrica e como consequência podem gerar os estados conhecidos como gelo de spin, ex. ($Dy_2Ti_2O_7$), líquido de spin, ex. ($Na_4Ir_3O_8$) e ferromagnetismo fraco [4, 5], a exemplo do (La_2CuO_4). Nessa parte do trabalho determinamos o diagrama de fases no plano temperatura versus interação (DM) e o diagrama de grandezas termodinâmicas como magnetização e susceptibilidade magnética.

A segunda abordagem feita com o referido modelo é direcionada a sistemas desordenados, [6, 7] e a modelagem para este caso foi feita na aproximação de campo efetivo via operador diferencial para uma rede cúbica simples, num aglomerado contendo dois spins. A desordem nas ligações entre os spins da rede [6] é dada pela função de distribuição $P(K_{ij})$ e uma segunda função de distribuição trimodal $P(h_i)$ para o campo externo [8] é também adicionada ao formalismo. Com isso, podemos estimar a temperatura de transição do sistema e discutirmos os diagramas de fase nos planos $T_c \times h$ e $T_c \times \alpha$, onde pode-se constatar comportamento reentrante para alguns valores específicos dos parâmetros α e p que regem as distribuições das ligações e do campo externo respectivamente, e a existência dos pontos crítico e tricríticos também para valores distintos dos mesmos parâmetros.

No Capítulo 2, são apresentadas as teorias básicas que fundamentam os cálculos e análises posteriormente efetuados no desenvolver do trabalho como modelo hamiltoniano, relações da mecânica estatística e termodinâmica [3, 18], e bem como as explicações sobre as aproximações e do termo de anisotropia.

No Capítulo 3, é feita uma discussão dos principais trabalhos e resultados que nortearam o presente texto.

No Capítulo 4, são apresentados os resultados e discussões pertinentes ao modelo de Heisenberg ferromagnético de spin 1/2 nas aproximações de campo médio e efetivo nas duas redes cristalinas abordadas.

No Capítulo 5, são feitas as conclusões a respeito do trabalho desenvolvido nesta tese e as perspectivas futuras sobre o prosseguimento dos trabalhos.

Quanto aos apêndices A, B e C, nestes constam uma discussão mais didática a respeito da técnica do operador diferencial tomando por base a referência [38], e o apêndice (D) é destinado para a apresentação dos coeficientes da expansão da função da magnetização, os quais serão utilizados nas discussões da rede kagomé, e no apêndice (E) consta o trabalho publicado.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 MODELO

O estudo sobre magnetismo realizado no presente texto, se restringe a sistemas nos quais podemos considerar os momentos magnéticos fixos nos respectivos sítios das redes cristalinas abordadas. Para tal configuração dos momentos magnéticos, o modelo utilizado aqui é o de Heisenberg [16, 19].

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j . \quad (2.1)$$

ou

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} [J_{ij}^{xx} S_i^x S_j^x + J_{ij}^{yy} S_i^y S_j^y + J_{ij}^{zz} S_i^z S_j^z] . \quad (2.2)$$

O termo J_{ij} no hamiltoniano de Heisenberg acima, representa a interação de troca entre os momentos magnéticos, a qual é necessária para o alinhamento dos mesmos, tendo origem na interação eletrostática entre os átomos vizinhos e sua representação matemática [26, 27] é escrita na sequência:

$$J_{ij} = \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \psi_i^* (\vec{r}_1) \psi_i (\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_j (\vec{r}_1) \psi_j^* (\vec{r}_2) . \quad (2.3)$$

Sendo $\psi_i (\vec{r}_1)$ e $\psi_i (\vec{r}_2)$ as funções de onda dos elétrons dos átomos vizinhos e $\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$, representa o termo de interação coulombiana entre os mesmos.

Para valores da interação de troca maiores que zero $J_{ij} > 0$, favorecerá um estado fundamental com ordenamento ferromagnético, e para $J_{ij} < 0$, o estado fundamental terá um ordenamento antiferromagnético. Variações do modelo de Heisenberg também dependem do valor que a interação de troca J_{ij} assume. O modelo de Heisenberg pode ser renomeado como:

$$\left\{ \begin{array}{ll} J_{ij}^{xx} = J_{ij}^{yy} = J_{ij}^{zz} & \longrightarrow \text{Modelo de Heisenberg Isotrópico.} \\ J_{ij}^{xx} \neq J_{ij}^{yy} \neq J_{ij}^{zz} & \longrightarrow \text{Modelo de Heisenberg Anisotrópico.} \\ J_{ij}^{xx} = J_{ij}^{yy} = 0 & \longrightarrow \text{Modelo de Ising.} \\ J_{ij}^{xx} \neq J_{ij}^{yy}, J_{ij}^{zz} = 0 & \longrightarrow \text{Modelo XY Anisotrópico.} \\ J_{ij}^{xx} = J_{ij}^{yy} = J_{ij}^{zz} = 0 & \longrightarrow \text{Modelo XY Isotrópico.} \end{array} \right. \quad (2.4)$$

Os termos S_i^ν ($\nu = x, y, z$) são os operadores de spins, também chamados de matrizes de Pauli. Para o modelo de Heisenberg, como já citado no primeiro capítulo, inserimos termos ao hamiltoniano afim de estudar o comportamento dos sistemas analisados no regime das transições de fase, e bem como para investigar a existência dos pontos tricríticos, comportamento reentrante e outros comportamentos associados que podem ser analisados dentro desse formalismo.

2.2 RELAÇÕES DA MECÂNICA ESTATÍSTICA COM A TERMODINÂMICA

Para que existam as manifestações magnéticas na matéria condensada, um dos fatores essenciais é a interação de troca J_{ij} , a qual atua dando um ordenamento aos momentos magnéticos dos átomos na rede cristalina dos materiais. Essa interação com origens elétrica e quântica eq.(2.3), é inserida em um contexto competitivo pela natureza com a energia térmica, ou seja, a medida que a interação de troca tente a levar o sistema a uma configuração final ordenada, a energia térmica segue o caminho contrário a essa tendência, levando os momentos magnéticos do material a uma configuração de desordem onde o campo magnético perceptível macroscopicamente deixará de existir.

Devido a esse fator físico, da grande influência térmica sobre os fenômenos relacionados ao magnetismo, se faz necessária a inserção de teorias da mecânica estatística como o ensemble e sua respectiva função de partição [15, 16], que associando a termodinâmica por meio das derivadas da energia livre a qual depende da referida função de partição, se configuram como teorias importantes para análises termomagnéticas. Operacionalmente, temos na tabela (2.1) na sequência, as relações das grandezas termodinâmicas [18, 19], conhecendo-se a função de partição $\mathbb{Z}(T, H) = \sum_i e^{-\beta E_i}$ sendo a energia livre dada por $F = -kT \ln(\mathbb{Z})$.

Conhecendo-se as funções da tabela (2.1), é também possível analisar a criticidade dos sistemas sob as perspectivas da teoria clássica de Landau, a qual fundamenta-se

Tabela 2.1 Variáveis termodinâmicas para sistemas magnéticos.

Função de Partição	$\mathbb{Z}(T, H) = \sum_i e^{-\beta E_i}$
Energia Livre	$F = -k_B T \ln(\mathbb{Z})$
Energia Interna	$U = -\frac{\partial \ln(\mathbb{Z})}{\partial \beta}$
Entropia	$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_H$
Magnetização	$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T$
Calor Específico	$C_H = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_H$ ou $C_X = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_X$, sendo $X = H, M$
Susceptibilidade Isotérmica	$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T$

na expansão da função da energia livre em uma série de potências em relação ao parâmetro de ordem do sistema em questão, sendo os coeficientes dessa expansão, funções de parâmetros que influenciam o sistema abordado. O parâmetro de ordem são grandezas termodinâmicas que assumem valores diferentes de zero em uma fase ordenada e zero na fase desordenada, permitindo assim, determinar a topologia dos diagramas de fase.

2.3 CAMPO MEDIO

Até o presente momento, soluções exatas para modelos hamiltonianos de spin só são possíveis em situações muito simplificadas de dimensionalidade da rede. Sendo assim, muitos métodos aproximativos foram desenvolvidos no intuito de extrair informações sobre o sistema, ao passo que reduz a dificuldade algébrica do processo.

O campo médio é uma aproximação intensivamente utilizada em tratamentos teóricos não só no estudo do magnetismo, mas também em muitos sistemas que possuem um grande número de interações como teoria dos jogos e neuromatemática. Essa aproximação foi proposta inicialmente por Weiss e tem como fundamento a substituição das interações mútuas de todos íons magnéticos nos sítios da rede cristalina, por uma única interação (interação média) sem flutuações e proporcional ao número de íons da rede sobre cada sítio, o que leva à redução do problema de muitos corpos para um único, facilitando consideravelmente o desenvolvimento algébrico do sistema abordado.

A descrição fornecida pelo campo médio é de notável relevância[3, 17], mas possui aspectos limitantes a exemplo do valor da temperatura crítica que é superestimada para dimensionalidade da rede $n \leq 3$. Para dimensionalidade $n \geq 4$ o valor fornecido para a temperatura crítica via campo médio é considerado bom, mas nesse regime o interesse é mais do ponto de vista matemático do que físico. Nessa aproximação, o hamiltoniano de Ising para uma rede de spin n -dimensional é dada por:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \phi J \langle S \rangle S_i - h \sum_{i=1}^N S_i = - \sum_{i=1}^N E(J, h) S_i, \quad (2.5)$$

sendo J a constante de acoplamento e ϕ é o número de spins vizinhos. De $E(J, h) = \frac{1}{2} \phi J \langle S \rangle + h$, temos que o fator $\frac{1}{2}$ garante a não repetição da soma da contribuição de um mesmo par de spins, e $\phi J \langle S \rangle S_i$ é a interação magnética média sobre um determinado sítio i gerado pela vizinhança[19, 22], sendo que cada vizinho contribui do mesmo valor $\langle S \rangle$, ou seja, $\langle S \rangle \equiv \langle S_i \rangle$ é o spin médio por sítio.

2.4 CAMPO EFETIVO

Outra aproximação utilizada na realização dos trabalhos apresentados nesse texto é a de campo efetivo, a qual se utiliza da técnica do operador diferencial[38]. O campo efetivo fornece relações exatas, sendo um recurso com grande potencial para descrever sistemas magnéticos. As discussões a respeito desse formalismo estão mais cuidadosamente desenvolvidas nos apêndices A e B. Na sequência vamos descrever de forma progressiva a referida aproximação. Consideremos um sistema que contém N sítios interagentes numa rede cristalina arbitrária como na Fig.(2.1), separando o sistema em dois subsistemas Ω

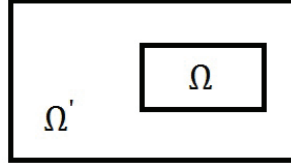


Figura 2.1 Esquema que representa um sistema com N sítios interagentes.

e Ω' , tendo o subsistema Ω , n variáveis de spin e Ω' (é a parte restante que não possui nenhum spin de Ω) com $(N - n)$ variáveis de spin[10, 11], podemos representar o hamiltoniano da seguinte forma abaixo.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}. \quad (2.6)$$

Agora, assumindo que \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}'_{\Omega'}$ comutam $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}'_{\Omega'}] = 0$ (situação clássica)[14] e que o sistema é isolante, podemos desenvolver os cálculos usando as definições do ensemble canônico[3], com a sua respectiva função de partição[17].

$$\mathbb{Z} = \sum_i e^{-\beta E_i} . \quad (2.7)$$

No ensemble canônico a média de uma quantidade termodinâmica Λ é dada por

$$\langle \Lambda \rangle = \frac{T_r [\Lambda e^{-\mathcal{H}}]}{\mathbb{Z}} , \quad (2.8)$$

sendo $f(\Omega)$ uma função das variáveis de spin do subsistema Ω , o valor médio da grandeza $f(\Omega)$ é

$$\langle f(\Omega) \rangle = \frac{T_r \left\{ f(\Omega) e^{-[\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}}{T_r \left\{ e^{-[\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}} , \quad (2.9)$$

tomando inicialmente o traço sobre os spins inseridos no subsistema Ω

$$\langle f(\Omega) \rangle = \frac{T_{r'\Omega'} T_{r\Omega} \left\{ f(\Omega) e^{-[\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}}{T_{r'\Omega'} T_{r\Omega} \left\{ e^{-[\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}} , \quad (2.10)$$

$$\langle f(\Omega) \rangle = \frac{T_{r'\Omega'} \left\{ e^{-\mathcal{H}'_{\Omega'}} \right\} T_{r\Omega} \left\{ f(\Omega) e^{-\mathcal{H}_\Omega} \right\}}{T_{r'\Omega'} \left\{ e^{-\mathcal{H}'_{\Omega'}} \right\} T_{r\Omega} \left\{ e^{-\mathcal{H}_\Omega} \right\}} . \quad (2.11)$$

Multiplicando a eq. acima por $\frac{T_{r\Omega} [e^{-\mathcal{H}_\Omega}]}{T_{r\Omega} [e^{-\mathcal{H}_\Omega}]} = 1$, temos:

$$\langle f(\Omega) \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} T_r \left\{ e^{-\mathcal{H}_\Omega} \frac{T_{r\Omega} [f(\Omega) e^{-\mathcal{H}_\Omega}]}{T_{r\Omega} [e^{-\mathcal{H}_\Omega}]} \right\} . \quad (2.12)$$

Pode-se verificar das equações (2.12) e (2.8) que a média térmica de $f(\Omega)$ no formalismo do ensemble canônico é representada por:

$$\langle f(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{T_{r\Omega} [f(\Omega) e^{-\mathcal{H}_\Omega}]}{T_{r\Omega} [e^{-\mathcal{H}_\Omega}]} \right\rangle , \quad (2.13)$$

sendo $T_{r\Omega}$ o traço parcial mensurado sobre as variáveis de spin do subsistema Ω representado pelo hamiltoniano \mathcal{H}_Ω e $\langle \cdot \cdot \cdot \rangle$ exprime a média termodinâmica, com base no hamiltoniano total \mathcal{H} do sistema. A relação (2.13) pode ser utilizada para spins de qualquer valor e para qualquer relação funcional $f(\Omega)$, ficando condicionado apenas a comutação dos hamiltonianos dos subsistemas \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}'_{\Omega'}$ (sistema clássico). Para considerar spins

que não pertencem ao subsistema Ω , uma outra identidade é definida como segue:

$$\langle A(\Omega') f(\Omega) \rangle = \left\langle A(\Omega') \frac{T_{r\Omega} [f(\Omega) e^{-\mathcal{H}_\Omega}]}{T_{r\Omega} [e^{-\mathcal{H}_\Omega}]} \right\rangle. \quad (2.14)$$

Mesmo sendo uma relação exata, a eq.(2.13) não é de simples desenvolvimento algébrico. Para demonstrar consideremos o modelo de Ising abaixo:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i,j} K_{ij} S_i S_j, \quad (2.15)$$

sendo $S_i = \pm 1$ as variáveis de spin e o termo $K_{ij} = \beta J_{ij}$, com $\beta = \frac{1}{k_B T}$, temos que $K_{ij} = \frac{J_{ij}}{k_B T}$. Os termos da razão k_B e T são a constante de Boltzmann e temperatura absoluta respectivamente, enquanto que J_{ij} é a interação de troca responsável pelo ordenamento magnético do material. Um aspecto importante da aproximação de campo efetivo é a distinção feita ao considerar as interações com os primeiros vizinhos.

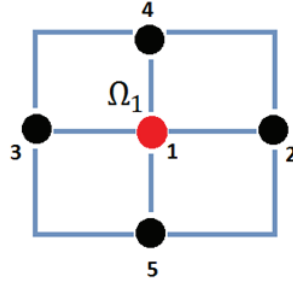


Figura 2.2 Cluster com um íon.

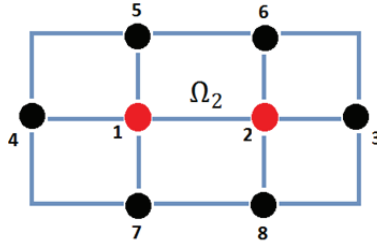


Figura 2.3 Cluster com dois íons.

Para a Fig.2.2 onde o cluster contém uma única partícula o hamiltoniano fica $-\beta\mathcal{H} = \sum_{1,j \neq 1} K_{1j} S_1 S_j$ e para a Fig. (2.3), temos $-\beta\mathcal{H} = K_{12} S_1 S_2 + \sum_{1,j \neq 1} K_{1j} S_1 S_j + \sum_{i \neq 2,2} K_{i2} S_i S_2$. Podemos verificar que no primeiro caso, Fig.(2.2), o hamiltoniano considera de forma discriminada cada interação do único spin do cluster com os seus primeiros

vizinhos, e no caso da Fig.(2.3), além das interações de cada partícula do cluster com seus primeiros vizinhos, é considerada também no hamiltoniano a interação entre as partículas que constituem o cluster. As relações $m_1 = \langle f(\Omega_1) \rangle$ e $m_2 = \langle f(\Omega_2) \rangle$ são as respectivas magnetizações para os tipos de cluster com uma e duas partículas das figuras (2.2) e (2.3), associadas a eq.(2.13) obtemos as medias térmicas das magnetizações por spin para o modelo de Ising:

$$m_1 = \left\langle \tanh \left(\sum_{1,j \neq 1} K_{1j} S_j \right) \right\rangle , \quad (2.16)$$

$$m_2 = \left\langle \frac{\sinh \left(\sum_{1,i \neq 1} K_{1i} S_i + \sum_{2,j \neq 2} K_{2j} S_j \right)}{\cosh \left(\sum_{1,i \neq 1} K_{1i} S_i + \sum_{2,j \neq 2} K_{2j} S_j \right) + e^{-K_{12}} \cosh \left(\sum_{1,i \neq 1} K_{1i} S_i - \sum_{2,j \neq 2} K_{2j} S_j \right)} \right\rangle . \quad (2.17)$$

As equações (2.16) e (2.17), acima são conhecidas como a identidade de Callen e Suzuki. Essas relações são exatas e exigem um grande esforço algébrico e com as variáveis de spin nos argumentos das funções hiperbólicas elas se tornam insolúveis. O artifício matemático utilizado para remover os operadores de spins dos argumentos das funções é a técnica do operador diferencial, sendo que a mesma não altera a natureza exata dos resultados gerados pelas equações (2.16) e (2.17). A definição da ação do operador diferencial segue abaixo:

$$e^{\lambda D_x} f(x) = f(x + \lambda) , \quad (2.18)$$

$$e^{\lambda D_x + \gamma D_y} g(x, y) = g(x + \lambda, y + \gamma) . \quad (2.19)$$

Nas relações (2.18) e (2.19) D_x e D_y são os operadores diferenciais, que de forma explicita é escrito como $D_\nu = \frac{\partial}{\partial \nu}$ ($\nu \equiv x, y$) . Ao realizar a aplicação desses operadores nas equações (2.16) e (2.17), elas são reescritas da seguinte forma:

$$m_1 = \left\langle \prod_{j \neq 1} e^{K_{1j} S_j D_x} \right\rangle f(x) |_{x=0} , \quad (2.20)$$

$$m_2 = \left\langle \prod_{i \neq 2} e^{K_{1i} S_i D_x} \prod_{j \neq 1} e^{K_{2j} S_j D_y} \right\rangle g(x, y) \big|_{x=0, y=0} , \quad (2.21)$$

onde os produtórios são executados sobre todos os vizinhos excluindo os spins que constituem o cluster e as funções $f(x)$ e $g(x, y)$ são definidas abaixo:

$$f(x) = \tanh(x) , \quad (2.22)$$

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K_{12}} \cosh(x - y)} . \quad (2.23)$$

Quando acontece de um cluster contendo dois spins, como o da Fig.(2.3), possuir vizinhos em comum, o formalismo do campo efetivo também distingue essas contribuições e a eq. (2.21), fica :

$$m_2 = \left\langle \prod_i e^{K_{1i} S_i D_x} \prod_j e^{K_{2j} S_j D_y} \prod_\delta e^{S_\delta (K_{1\delta} D_x + K_{2\delta} D_y)} \right\rangle g(x, y) \big|_{x=0, y=0} , \quad (2.24)$$

sendo que os índices i, j se referem aos vizinhos dos sítios 1 e 2 de forma isolada e o índice δ se refere aos vizinhos em comum aos sítios 1 e 2 [6, 7]. Tais distinções ao considerar as interações é o que dá mais confiabilidade a abordagem de campo efetivo se comparando por exemplo, a aproximação de campo médio. O próximo passo é usar a identidade de Van der Warden eq.(2.25), nas equações (2.20) e (2.24).

$$e^{\lambda S_k} = \cosh(\lambda) + S_k \sinh(\lambda) ; S_k = \pm 1 . \quad (2.25)$$

Para sistemas de spin com dois estados, podemos escrever.

$$m_1 = \left\langle \prod_j [\cosh(K_{1j} D_x) + S_j \sinh(K_{1j} D_x)] \right\rangle f(x) \big|_{x=0} , \quad (2.26)$$

$$m_2 = \left\langle \prod_i [\cosh(K_{1i}D_x) + S_i \sinh(K_{1i}D_x)] \times \prod_j [\cosh(K_{2j}D_y) + S_j \sinh(K_{2j}D_y)] \times \right. \\ \left. \prod_\delta [\cosh(K_{1\delta}D_x + K_{2\delta}D_y) + S_\delta \sinh(K_{1\delta}D_x + K_{2\delta}D_y)] g(x, y) \right|_{x=0, y=0} \cdot (2.27)$$

As funções $f(x)$ e $g(x, y)$ que estão definidas pelas equações (2.22) e (2.23), são classificadas como funções ímpares, pois obedecem a seguinte propriedade

$$f(x) = -f(-x) \ , \quad (2.28)$$

$$g(x, y) = -g(-x, -y) \ . \quad (2.29)$$

Funções ímpares $\Phi(D)_{\text{impar}}$, agindo sobre uma das funções $f(x)$ ou $g(x, y)$ contribuem para as equações (2.26) e (2.27) , isto é :

$$\Phi_{\text{par}}(D_x) f(x) \big|_{x=0} = 0 \ , \quad (2.30)$$

$$\Phi_{\text{Par}}(D_x, D_y) g(x, y) \big|_{x=0, y=0} = 0 \ . \quad (2.31)$$

As equações (2.26) e (2.27) são a estrutura do presente formalismo, sendo assim, definido o tipo de rede, as equações citadas estabelecerão relações que consideram todas as correlações de multi-spins peculiares ao problema em estudo. Ressaltando que essas considerações das inúmeras correlações não é algo trivial. Mas, ao utilizar o desacoplamento de Zernike que consiste na desconsideração das correlações multi-spins eq.(2.32), viabiliza o trabalho algébrico.

$$\langle S_i S_j \dots S_n \rangle \simeq \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \dots \langle S_n \rangle \ . \quad (2.32)$$

O fato de ter desconsiderado as correlações de multi-spins não implica na técnica discutida que ocorra alguma alteração das propriedades cinemática local de spin $S_i^{2n} = 1$ e $S_i^{2n+1} = S_i$, sendo n um número natural ($n=0, 1, 2, \dots$).

2.5 TRANSIÇÃO DE FASE

Outra teoria de grande importância na fundamentação do estudo apresentado é a teoria das transições de fase proposta por Landau[15, 19] na década de 30. Transições de fases ocorrem em inúmeros sistemas físicos, a exemplo de materiais ferroelétricos, fluidos e superfluidos, supercondutores, sistemas magnéticos e em muitos outros. Afim de estudar o comportamento de sistemas físicos na eminência da transição, Landau tomou como referencia suposições fenomenológicas, inserindo a definição de parâmetro de ordem, que pode ser uma grandeza escalar, vetorial ou um tensor que caracterize o sistema em questão.

Do ponto de vista matemático, para realizar análises a respeito da criticalidade dos sistemas, a tarefa ficou a cargo da função da energia livre \mathcal{F} , que deve ser expandida em uma série de potências em função dos invariantes do parâmetro de ordem, consequentemente impõem-se que a função da energia livre seja continua próximo a transição. Ao determinar a série de potência, seus coeficientes[18, 32] exibem uma dependência funcional com as grandezas termodinâmicas inerentes ao tipo de sistema e para valores específicos atribuído aos mesmos, se faz as considerações a respeito do comportamento e do tipo de transição sofrida.

Esses termos da expansão ainda são condicionados a simetria do problema, pois só os termos da série que satisfazem a simetria do sistema são utilizados. Como a nossa abordagem diz respeito a sistemas magnéticos, vamos exemplificar através de um ferromagneto na ausência de campo externo. A expansão da energia livre fica:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + a_2 m^2 + a_4 m^4 , \quad (2.33)$$

sendo \mathcal{F}_0 a energia livre que não está diretamente relacionada com a transição de fase, e os coeficientes a_2 e a_4 são funções das variáveis que influenciam o sistema como mencionado acima. Nesse caso, o parâmetro de ordem é a magnetização (grandeza vetorial) e a série foi truncada em $O(m^4)$, pois esses termos satisfazem a simetria do sistema sendo invariantes sobre a mudança do sinal da magnetização. O comportamento gráfico pode ser visualizado na figura abaixo:

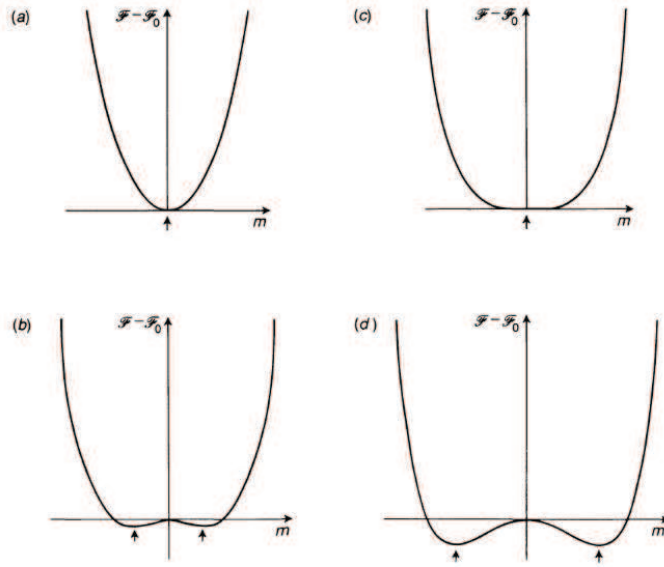


Figura 2.4 Variação da energia livre de Landau com a magnetização para valores decrescentes de a_2 . Referência[18].

No caso de $a_2 > 0$, o valor mínimo de \mathcal{F} se dá para $m = 0$, indicando uma fase paramagnética Fig.2.4(a). Para $a_2 < 0$, a energia livre corresponde para um valor finito de m_0 exibindo uma fase ferromagnética Fig.2.4(d). Agora, no caso de $a_2 = 0$, equivale a temperatura crítica onde surge magnetização espontânea Fig.2.4 (b). Com $a_2 \rightarrow 0^-$, o comportamento gráfico da energia livre decresce para zero, indicando que a magnetização se torna diferente de zero continuamente, mas com derivadas descontínuas Figs.2.4 (c) e (d). Discussões similares a essa utilizando os coeficientes da expansão em serie serão utilizadas nas seções (4.1) e(4.2).

2.6 INTERAÇÃO DZIALOSHINSKY-MORIYA (DM)

A proposta do termo de anisotropia de Dzyaloshinsky-Moriya (DM), teve como ponto de partida a discussão a respeito do ferromagnetismo “fraco” [23], essa forma de ferromagnetismo apresenta menor magnitude em termos do momento magnético, se comparado ao de um ferromagneto normal. Materiais do tipo: $\alpha - Fe_2O_3$, $MnCO_3$ e $CoCO_3$ apresentam essa modalidade de ferromagnetismo. Ao estudar esses materiais Dzyaloshinsky em 1957 utilizou o ferramental teórico referente as transições de fases proposta por Landau, e conhecimentos de física do estado sólido. Em seu trabalho, Dzyaloshinsky explica essa forma de ferromagnetismo através de argumentações de grupo de simetria dos íons magnéticos na rede cristalina e pela presença de impurezas nas redes, sem deixar claro

sua origem.

Posteriormente, um outro trabalho que também trata do ferromagnetismo “fraco”, agora com base em teorias como interação de supertroca e de perturbação, foi publicado por Tôru Moriya[24], em 1960 onde esse efeito fraco para o ferromagnetismo é explicado via acoplamento spin-órbita, sendo proposto o termo anisotrópico abaixo:

$$\vec{d} \cdot [\vec{S}_1 \times \vec{S}_2] , \quad (2.34)$$

onde $\vec{d} = d\hat{k}$ é o vetor de acoplamento (d é o parâmetro de interação (DM) e \hat{k} é o versor na direção z) e $\vec{S}_i (i = 1, 2)$ são operadores de spin.

Esse termo da relação (2.34), é conhecido como interação Dzyaloshinsky-Moriya (DM), onde é empregado no formalismo de hamiltoniano de spin como a contribuição energética anisotrópica ao modelar sistemas com essa característica, sendo assim, o uso desse referido termo de acoplamento anisotrópico não se restringe ao chamado ferromagnetismo “fraco” e sim a qualquer arranjo de spins em uma rede cristalina que possua uma baixa simetria. Esse termo será empregado na seção 4.1, para estudar o comportamento de grandezas termodinâmicas na rede kagomé, sendo que, em termos geométricos essa rede possui uma simetria bem definida, mas não favorável do ponto de vista energético.

TRABALHOS DE FUNDAMENTAÇÃO

3.1 MODELO DE HEISENBERG NA APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

As abordagens referentes a sistemas magnéticos assinalam a existência de pontos tricríticos que podem ser determinados analiticamente em diagramas de fase, oriundos de modelos clássicos ou quânticos, a exemplo dos modelos XY e Heisenberg. Um caminho tomado para determinar o ponto tricrítico, bem como a descrição do comportamento crítico como um todo, é adicionar termos de anisotropia aos modelos hamiltonianos de spin utilizado, Sousa , Albuquerque, et.Al. em 1994 [25], estudaram o comportamento crítico do modelo de Heisenberg adicionado de um parâmetro anisotrópico de troca representado por Δ , e pelo termo de anisotropia de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [24], para um cluster com dois spins, na aproximação de campo médio, a campo externo nulo, em uma rede cúbica simples. O hamiltoniano fica:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_{ij} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) . \quad (3.1)$$

Usando esse formalismo foi determinado a função de partição, dada por:

$$\mathbb{Z} = 2e^K \left\{ \cosh(2\beta h) + e^{-2K} \cosh \left(2K \sqrt{(1 - \Delta)^2 + d^2} \right) \right\} , \quad (3.2)$$

e a magnetização m foi determinada minimizando a energia livre definida a partir da eq.(3.2). O comportamento crítico é analisado com base na expansão em serie de potência da energia livre, para m em torno de zero ($m = 0$), resultando em: $f(m, T) \approx f(0, T) + (q - 1)(1 - a)m^2 - bm^4 - cm^6 \dots$. Com base nos valores assumidos pelos coeficientes a, b e c são feitas as considerações referentes ao estudo do comportamento crítico. No diagrama $T \times d$, o ponto tricrítico é escrito explicitamente para a seguinte condição $a = 1$ e $b = 0$ com $c < 0$, determinando assim o seguinte par ordenado $T_t = \frac{2}{3}(q - 1)$ e $d = \sqrt{\frac{1}{4} \cdot T_t^2 \left\{ \operatorname{arccosh} \left(2e^{\frac{2}{T_t}} \right) \right\} - (1 - \Delta)^2}$, sendo válido para qualquer número de coordenação q da rede cristalina. Em 1995 Sousa, Lacerda, et.Al. [28] repetem o mesmo

formalismo para o modelo de Heisenberg realizado em 1994, agora adicionando ao hamiltoniano de spin o termo de campo externo. No diagrama $T \times d$, obtido nesse referido trabalho três curvas foram obtidas para valores distintos do parâmetro de troca Δ , mostrando que a temperatura tricrítica é independente do parâmetro de anisotropia de troca. Outro diagrama obtido foi o $m \times T$, para o caso $\Delta = 1$, onde o modelo de Heisenberg se reduz ao modelo de Ising e a dependência da magnetização com relação a temperatura reduzida é analisada para quatro valores do parâmetro (DM) $d/J = 3, 42, 3, 38$ e $0, 8$, evidenciando dessa forma a tendência que a interação (DM) tem em destruir o ordenamento magnético do sistema.

No ano de 1998 Sousa, Lacerda et. Al. [5] fazem uma análise do comportamento tricrítico e crítico de mais propriedades termodinâmicas como: energia interna, calor específico, susceptibilidade magnética e o inverso da susceptibilidade em função do parâmetro (DM), além da obtenção dos diagramas $T \times d$ e $m \times T$, já tratados nos primeiros trabalhos discutidos aqui. Sendo essas grandezas definidas com o mesmo formalismo para o modelo de Heisenberg em uma rede cúbica simples para o caso $\Delta = 1$ (modelo de Ising), a campo médio num cluster contendo dois spins.

O comportamento térmico apresentado pela energia interna indica que, quanto menor o parâmetro (DM), maior será a energia interna. Na sequência, o calor específico foi determinado através da derivada numérica da energia interna e os picos do gráfico do calor específico que evidenciam a existência de uma transição de fases apresentam valores distintos à medida que o parâmetro (DM) é modificado. O efeito do parâmetro (DM) na susceptibilidade foi de diminuí-la à medida que d/J cresce.

Em 2006, Guang-Hou Sun et. Al. [30] trataram o modelo de Heisenberg na aproximação de campo médio num cluster com dois spins a campo externo nulo, adicionado do termo de anisotropia (DM) para o valor de spin = 1, em uma rede cúbica simples. O diagrama $T \times d$, para o modelo com esse valor de spin exibe uma temperatura tricrítica (T_t) menor que o caso do spin = $1/2$, mas o valor de d_c/J é maior se comparado aos trabalhos das referências [5, 25, 28].

Outro trabalho que utiliza o modelo de Heisenberg de spin = 1, foi tratado por Carvalho, Plascak et. Al. [31] publicado em 2013, usando como técnica aproximativa a teoria de campo médio, adicionando um termo de campo externo H e de um campo cristalino D , no hamiltoniano de spin de Heisenberg, além do parâmetro de troca. Neste trabalho, os diagramas da magnetização em função da temperatura mostram o comportamento da magnetização para alguns valores do campo cristalino D . Para $\eta = 1$, duas transições contínuas aparecem no diagrama $m \times T$, para valores negativos de D . Por

outro lado, o diagrama de fases temperatura reduzida versus campo cristalino evidência as transições de primeira e de segunda ordens separadas pelo ponto tricritico.

Muito recentemente, um dos vários trabalhos de cunho experimental conhecidos na literatura envolvendo a interação de anisotropia de Dzyaloshinskii-Moriya foi publicado na Physical Review B intitulado "Dzyaloshinskii-Moriya Interaction and spin reorientation transition in the frustrated kagomé lattice antiferromagnet"[12]. Neste trabalho, grandezas termodinâmicas como magnetização e calor específico e diagramas de fase foram obtidas para alguns tipos de jarositas [35, 36, 37] de spin 5/2 como: jarosita de prata e jarosita de Potássio. Esses compostos possuem uma rede cristalina tipo kagomé, a qual exibe frustração magnética. Sistemas magnéticos como as jarositas e outros compostos que apresentam frustração magnética podem ser melhor descritos numa abordagem teórica através da inserção de termos de anisotropias como a interação (DM). A adição de tais termos viabiliza encontrar transições de primeira ordem, continua e pontos multicríticos, contribuindo para a melhoria dos dados obtidos.

3.2 MODELO DE HEISENBERG NA APROXIMAÇÃO DE CAMPO EFETIVO

Na aproximação de campo efetivo, usando a técnica do operador diferencial, são inseridas funções de distribuição que regem as interações entre sítios primeiros vizinhos e a direção de aplicação de campos externos. Fenômenos de reentrância, pontos tricríticos e outros aspectos referentes as transições de fase são estudados satisfatoriamente com esse tratamento.

Trabalhando nessa linha, um estudo publicado em 2005 por Albuquerque et.al.[39], foi desenvolvido usando a técnica do operador diferencial e a teoria de campo efetivo, o comportamento crítico do modelo de Heisenberg clássico ferromagnético de spin 1/2, para uma rede cúbica simples sob a influencia de um campo aleatório. Foram apresentados no referido trabalho os diagramas de fases nos planos $T \times H$ e $T \times \alpha$, sendo T a temperatura, H o campo aleatório e α o parâmetro associado com a função de distribuição para as ligações entre os sítios. No diagrama $T \times H$, são geradas curvas para valores distintos do parâmetro α num intervalo de $0 \leq \alpha \leq 1,476$, onde o comportamento reentrante é visualizado, e bem como a mudança no tipo de transição sinalizada pela existência dos pontos tricríticos nesse diagrama. O segundo diagrama apresentado nesse trabalho é no plano $T \times \alpha$, para valores fixos do parâmetro de campo h , no intervalo $0 \leq h \leq 2,8$, onde o comportamento reentrante também aparece. O surgimento de reentrância e de pontos tricríticos citados nesse formalismo, são atribuídos aos efeitos causados pela competição

existente entre as funções de distribuição de campo (distribuição trimodal) e de ligação, inseridas na modelagem desse sistemas.

Posteriormente, em uma publicação de 2006, Albuquerque et. Al.[40], aplicaram o mesmo formalismo agora ao modelo XY ferromagnético e os diagramas no planos $T \times H$ e $T \times \alpha$, mantiveram o mesmo padrão ao que se refere as transições de segunda ordem, ponto tricrítico e fenômeno reentrante.

Em 2007, outro trabalho realizado por Oliveira, Albuquerque et. Al.[41], foi realizado agora, com o modelo de Ising usando o método do campo efetivo e a técnica do operador diferencial, onde uma análise das propriedades termodinâmicas sobre a ação de um campo uniforme e um campo aleatório foi considerada. Aqui a função de distribuição que governa as interação entre os sítios primeiro vizinhos foi substituída pela ação de um campo uniforme e constatou-se que a competição entre os campos aleatório e uniforme também viabiliza o surgimento de reentrâncias e pontos tricriticos no diagrama $T \times H$, para valores de H no intervalo $1 < H/J \leq 1,5$. Para o intervalo $0 \leq H/J \leq 1$, o diagrama $T \times H$, não apresenta reentrâncias e a transição é contínua até o ponto tricritico como nos outros casos já citados até agora.

Seguindo esses procedimentos analíticos mencionados acima, para realizar análises a respeito do comportamento das transições de fase, Santos-Filho, Albuquerque et. Al. em 2016, publicaram [44], um estudo sobre o modelo de Heisenberg de spin $1/2$, ferromagnético, na aproximação de campo efetivo associado a técnica do operador diferencial em uma rede cúbica simples, com cluster contendo dois spins. Duas funções de distribuição são empregadas, uma para as interações entre os primeiros vizinhos (distribuição bimodal) e outra distribuição trimodal para o campo externo. Dentre os resultados gerados através dessa formulação estão as estimativas para a temperatura de transição e os diagramas de fase nos seguintes planos $T_c \times h$, $T_c \times p$ e $T_c \times \alpha$.

Confirmou-se a existencia da transição de fase, do ponto tricritico e das reentrancias nos diagramas como nos outros trabalhos com o mesmo formalismo. E que o comportamento tricrítico desaparece quando passamos de uma distribuição de probabilidade bimodal para uma trimodal através do parâmetro p , que está associado a distribuição de campo aleatório. E para $p = 1/3$, os pontos tricriticos desaparecem independentemente do valor de desordem na interação de troca, comprovando os resultados para a distribuição Gaussiana. No entanto, para $\alpha = 1$, o diagrama $T \times h$, não apresenta ponto tricritico independente do valor que p venha assumir.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Esse capítulo é destinado a apresentação do passo a passo das modelagens realizadas com o modelo de Heisenberg ferromagnético de spin $1/2$ sobre as redes kagomé e cúbica simple, nos respectivos formalismos dos campos médio e efetivo, bem como dos resultados obtidos. Para os resultados da rede kagomé, discussões a respeito do comportamento dos diagramas ainda estão sendo realizadas, antes de submetê-lo a publicação. Quanto aos resultados obtidos para a rede cúbica simples, o trabalho publicado está disponível no Apêndice (E).

4.1 MODELO DE HEISENBERG COM INTERAÇÃO (DM) REDE KAGOMÉ

Nesta seção será desenvolvido um estudo da rede tipo kagomé.

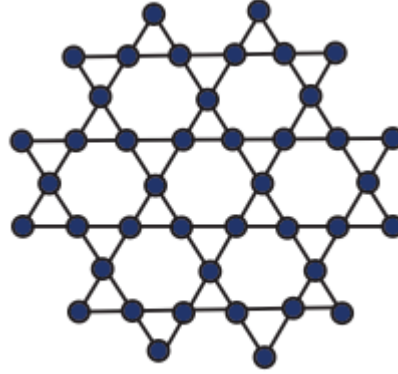


Figura 4.1 Rede Kagomé.

Para isso, faremos uso do modelo de Heisenberg ferromagnético de spin $(1/2)$, adicionado do termo anisotrópico de Dzyaloshinsky-Moriya (DM) [23, 24], e sob a influência de um campo externo, na aproximação de campo médio [3, 17]. O hamiltoniano é o seguinte:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \mathbf{d}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_i . \quad (4.1)$$

No primeiro termo do hamiltoniano (4.1), o fator $J_{ij} = J_{ji}$, é a integral de troca e o parâmetro Δ tem, nesse formalismo, a função de alterar o modelo utilizado, configurando-se como um termo anisotrópico de troca, que pode assumir valores no intervalo $0 \leq \Delta \leq 1$, modificando o modelo da seguinte forma [5]: para $\Delta = 0$ o modelo corresponde ao de Heisenberg isotrópico, para $\Delta = 1$ corresponderá ao de Ising e valores dentro do intervalo $0 < \Delta < 1$, o modelo será o de Heisenberg anisotrópico, lembrando que S_i^x, S_i^y e S_i^z são os operadores de spin. O segundo termo do hamiltoniano é o da interação (DM) [24], $\mathbf{d}_{ij} = d\hat{\mathbf{k}}$ ($\mathbf{d}_{ij} = -\mathbf{d}_{ji}$ antissimétrico) e será considerado no desenvolvimento dos cálculos na forma reduzida $d_0 = d/J$. Já o terceiro e último é a contribuição do campo externo $\mathbf{h} = h\hat{\mathbf{k}}$.

Para efetuar a modelagem dessa rede vamos considerar o cluster abaixo:

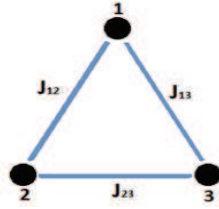


Figura 4.2 Cluster da rede kagomé.

O modelo hamiltoniano para esse caso é escrito como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{12}[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] - d_{12}(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) \\ & - J_{13}[(1 - \Delta)(S_1^x S_3^x + S_1^y S_3^y) + S_1^z S_3^z] - d_{13}(S_1^x S_3^y - S_1^y S_3^x) \\ & - J_{23}[(1 - \Delta)(S_2^x S_3^x + S_2^y S_3^y) + S_2^z S_3^z] - d_{23}(S_2^x S_3^y - S_2^y S_3^x) \\ & - h_0(S_1^z + S_2^z + S_3^z) \quad , \end{aligned} \quad (4.2)$$

sendo (J_{12}, J_{13}, J_{23}) e (d_{12}, d_{13}, d_{23}) os pares de interações de troca e os vetores acoplamento (DM) respectivamente, entre os íons que fazem parte do cluster da Fig.(4.2).

O termo $h_0 = (q - 1)Jm + h$ [15, 22], (onde $m = \langle \frac{1}{3}(S_1^z + S_2^z + S_3^z) \rangle$ e q é o número de vizinhos do íon) representa a magnetização do sistema na direção $\hat{\mathbf{k}}$.

Agora, considerando os estados possíveis dos spins no sítio i como:

$$\uparrow = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \downarrow = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

e as respectivas ações dos operadores de spin sobre os estados

$$\begin{aligned}
S^x |+\rangle &= |-\rangle; & S^y |+\rangle &= i |-\rangle; & S^z |+\rangle &= |+\rangle \\
S^x |-\rangle &= |+\rangle; & S^y |-\rangle &= -i |+\rangle; & S^z |-\rangle &= -|-\rangle.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Como o cluster em análise possui três sítios, temos que a seguinte representação para os estados $|+++\rangle, | - ++ \rangle, \dots | --- \rangle$, fornecendo assim, uma matriz 8×8 , pela relação 2^p sendo p o número de partículas do cluster. A matriz fica:

$$H = \begin{pmatrix} & |+++ \rangle & | - ++ \rangle & \cdots & | - + - \rangle & | - - - \rangle \\ \langle +++ | & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{17} & a_{18} \\ \langle - ++ | & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{27} & a_{28} \\ \langle + - + | & a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{37} & a_{38} \\ \langle +++ - | & a_{41} & a_{42} & \cdots & a_{47} & a_{48} \\ \langle - - + | & a_{51} & a_{52} & \cdots & a_{57} & a_{58} \\ \langle + - - | & a_{61} & a_{62} & \cdots & a_{67} & a_{68} \\ \langle - + - | & a_{71} & a_{72} & \cdots & a_{77} & a_{78} \\ \langle - - - | & a_{81} & a_{82} & \cdots & a_{87} & a_{88} \end{pmatrix}. \tag{4.5}$$

Onde os elementos da matriz transferência são escritos de forma explicita abaixo:

$$a_{11} = \langle +++ | H | +++ \rangle, \quad a_{12} = \langle +++ | H | - ++ \rangle,$$

$$a_{13} = \langle +++ | H | + - + \rangle, \dots, a_{88} = \langle - - - | H | - - - \rangle.$$

Diagonalizando a matriz 8×8 , [14] obtemos as respectivas autoenergias $E_1, E_2, E_3, \dots, E_8$, podendo agora determinar a respectiva função de partição canônica [15, 16].

$$\mathbb{Z} = \sum_i e^{-\beta E_i}. \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned}
\mathbb{Z} &= 2e^{3K} \cosh[3\beta h_0] + 2 \cosh[\beta h_0] e^{-K-4\beta \sqrt{d_0^2 + J^2(1-\Delta)^2} \sin[Y]} + \\
&\quad 4 \cosh[\beta h_0] e^{-K+2\beta \sqrt{d_0^2 + J^2(1-\Delta)^2} \sin[Y]} \times \\
&\quad \cosh[2\beta \sqrt{d_0^2 + J^2(1-\Delta)^2} \sqrt{3} \cos[Y]].
\end{aligned} \tag{4.7}$$

A equação acima é a função de partição, sendo $Y = \frac{\arctan\left(\frac{J(1-\Delta)}{d_0}\right)}{3}$. De posse da função

de partição do sistema em estudo, a conexão da mecânica estatística [18, 19], com a termodinâmica é estabelecida através das relações discutidas na seção 2.2. Desta forma, possibilitando a obtenção das grandezas termodinâmicas pertinentes aos objetivos do trabalho em questão.

4.1.1 Magnetização

A magnetização média na direção \hat{k} é

$$m = \left\langle \frac{1}{3} \cdot (S_1^z + S_2^z + S_3^z) \right\rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \frac{1}{3} (S_1^z + S_2^z + S_3^z) e^{-\beta \mathcal{H}} \right\}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}} = \frac{1}{3} \frac{\partial \ln \mathbb{Z}}{\partial (\beta h_0)}, \quad (4.8)$$

portanto, a função da magnetização média é dada por:

$$m(T, h) = \frac{1}{3} \frac{6e^{3K} \sinh [3K(q-2)m + 3\beta h] + \sinh [K(q-2)m + \beta h] \cdot \{\Xi\}}{2e^{3K} \cosh [3K(q-2)m + 3\beta h] + \cosh [K(q-2)m + \beta h] \cdot \{\Xi\}}, \quad (4.9)$$

sendo

$$\begin{aligned} \Xi = 2 \left(e^{-K-4\beta\sqrt{d_0^2+J^2(1-\Delta)^2}\sin[Y]} + 4e^{-K+2\beta\sqrt{d_0^2+J^2(1-\Delta)^2}\sin[Y]} \right) \times \\ \cosh \left[2\beta\sqrt{d_0^2+J^2(1-\Delta)^2}\sqrt{3} \cdot \cos[Y] \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde $Y = \frac{\arctan\left(\frac{J(1-\Delta)}{d_0}\right)}{3}$ é definido na seção (4.1).

Agora de posse da magnetização como uma função de T e de m eq.(4.9), podemos realizar o estudo do comportamento da transição de fases do sistema por meio da teoria de Landau [15, 5], discutida na seção 2.5. Essa discussão tem como ponto de partida a expansão da função da magnetização [19], com $h = 0$ em torno de $m_0 = m(T, h = 0) = 0$, (m_0 magnetização espontânea).

$$m_0 \simeq am_0 + bm_0^3 + cm_0^5 + \dots. \quad (4.11)$$

Os coeficientes a , b e c são funções [25, 28] de K , d_0 e Δ , onde os mesmos, estão disponíveis de forma explícita no Apêndice (D), sendo $K = \beta J$. Esses coeficientes fundamentam as discussões a respeito do comportamento do sistema nas proximidades da transição de fase, dentro do que prediz a teoria de Landau. As condições para as fases es-

tável e instável da função da magnetização e a condição para a determinação do diagrama de fases, serão considerados com base nestes coeficientes. Com manipulações algébricas elementares dos termos da expansão da eq.(4.9), foi possível determinar a relação[5, 30], da magnetização (4.12) abaixo.

$$m_0^2 = \frac{1-a}{b} . \quad (4.12)$$

Na sequência serão apresentados os diagramas da magnetização como função da temperatura reduzida $k_B T/J$, onde a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética pode ser observada, para três modelos definidos pelos valores do parâmetro Δ e com seus respectivos valores de d/J .

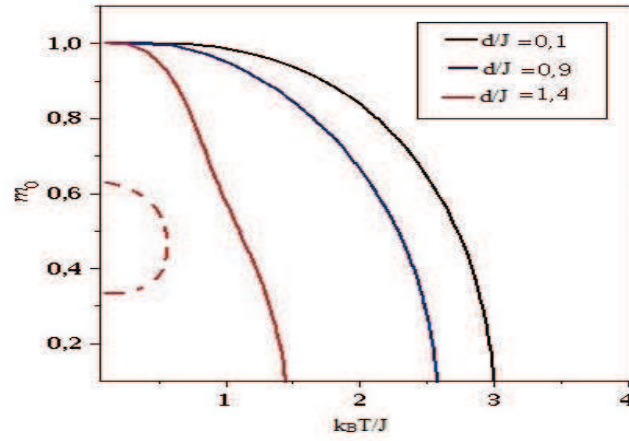


Figura 4.3 Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$).

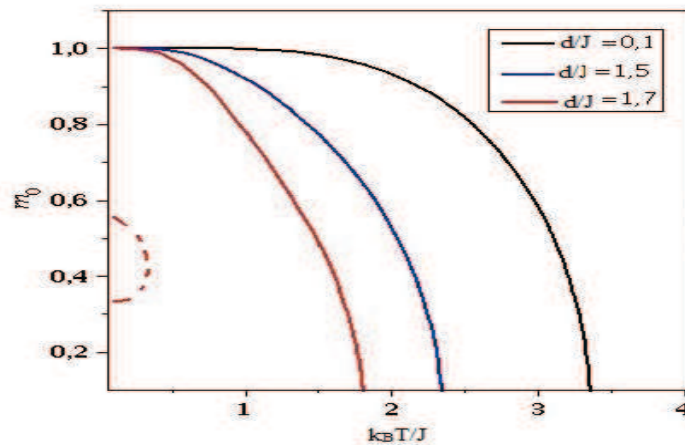


Figura 4.4 Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Heisenberg anisotrópico ($\Delta = 0,6$).

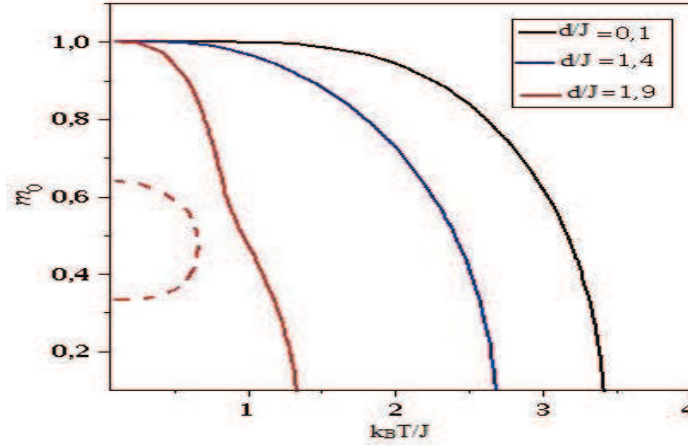


Figura 4.5 Magnetização em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, modelo de Ising ($\Delta = 1$).

De acordo com a discussão realizada na seção 2.5, a linha de transição de segunda ordem é determinada para $a = 1$ e $b < 0$. Pode-se observar que nas três figuras de (4.3) a (4.5), aparecem dois ramos (solução instável) da magnetização para um dado valor do parâmetro anisotrópico d/J , no caso dos modelos de Heisenberg isotrópico e anisotrópico os valores da interação (DM), para os quais ocorrem os duplos ramos na magnetização são $d/J = 1,4$ e $d/J = 1,7$ respectivamente. E para o caso Ising ($\Delta = 1$) o valor é $d/J = 1,9$. Evidenciando que neste formalismo, para modelos anisotrópicos o valor de d/J , deve ser maior se comparado a modelos isotrópicos para o surgimento do duplo ramo na magnetização. A temperatura crítica também é influenciada fortemente pelo fator (DM), nos três diagramas da magnetização a temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$, sofre uma diminuição a medida que d/J aumenta. Esse fato mostra a tendência da interação (DM), que é a de levar o sistema a um estado de desordem magnética, sendo mais um fator que “compete” com a interação \mathbf{J}_{ij} (responsável pelo ordenamento) além da agitação térmica.

4.1.2 Diagrama de Fase $T_c \times d_0$

O diagrama da Fig.(4.6) é obtido ao resolver o sistema de equações [25, 30], definido para os seguintes valores dos coeficientes da expansão da magnetização $a = 1$ e $b < 0$. Pode-se observar que a transição de fase é de segunda ordem, independentemente do valor que o parâmetro de troca Δ assuma dentro do intervalo $0 \leq \Delta \leq 1$, como discutido na seção 4.1. O valor da temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$, tende para $2/3$ a medida que a interação d/J aumenta de valor.

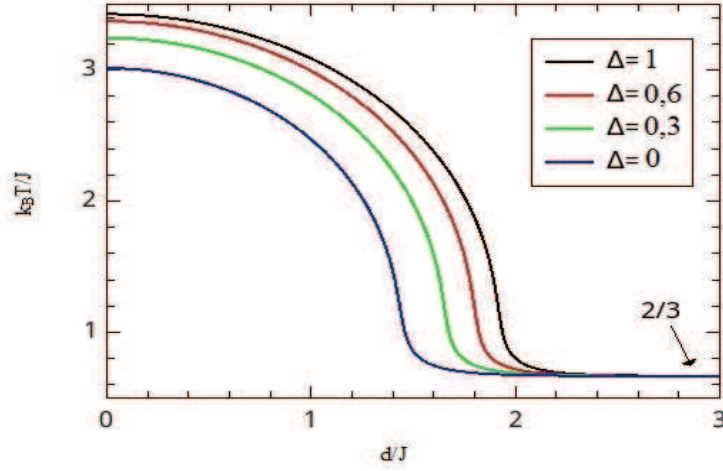


Figura 4.6 Diagrama de fase $T \times d$ para $q = 4$ e $\Delta = 0, 0.3, 0.6$ e 1 .

Um dos principais objetivos de adicionar o termo de anisotropia (DM), ao modelo de Heisenberg na aproximação de campo médio para a rede kagomé, é para investigar se há ocorrência de alguma alteração na forma da transição sofrida pelo sistema [12]. Tal mudança na forma da transição é assinalada pela presença do ponto tricritico (PTC), que no diagrama de fase aparece como um ponto de divisão entre as diferentes formas de transição. Para realizar essa investigação a condição que se impõe aos coeficientes da relação (4.11) segundo a teoria de Landau é $a = 1$ e $b = 0$. Com esses valores para os coeficientes foram realizadas avaliações numéricas, mas não se confirmou a existência do ponto tricrítico (PTC) para o modelo de Heisenberg com interação (DM) na rede tipo kagomé via campo médio .

4.1.3 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética é definida nesta seção como indicado na tabela (2.1), $\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right) |_{h=0}$, a susceptibilidade reduzida $\chi_0 \equiv \chi/J$, fica:

$$\chi_0 = \frac{1}{3} \times \left\{ \frac{18\beta e^{3K} \cosh[3K(q-2)m_0] + \beta \cosh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi}{2e^{3K} \cosh[3K(q-2)m_0] + \cosh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi} \right\} - \frac{1}{3} \times \left\{ \frac{6e^{3K} \sinh[3K(q-2)m_0] + \sinh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi}{\{2e^{3K} \cosh[3K(q-2)m_0] + \cosh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi\}^2} \right\} \times \left\{ \frac{6\beta e^{3K} \sinh[3K(q-2)m_0] + \beta \sinh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi}{\{2e^{3K} \cosh[3K(q-2)m_0] + \cosh[K(q-2)m_0] \cdot \Xi\}^2} \right\}. \quad (4.13)$$

Por definição, a susceptibilidade magnética informa a resposta do sistema à aplicação de um campo externo. A equação (4.13) é a função da susceptibilidade magnética reduzida para a rede kagomé na aproximação de campo médio. Como já foi discutido na seção 4.1, o formalismo apresentado aqui, para o modelo de Heisenberg via campo médio, onde é adicionado um parâmetro de troca (Δ), que possibilita fazer uma escolha do modelo hamiltoniano utilizado. Para que o modelo se reduza ao caso Ising, o parâmetro de troca deve assumir o valor um ($\Delta = 1$). Para esse caso, obtivemos três diagramas da susceptibilidade magnética com diferentes valores para a interação (DM), como segue abaixo:

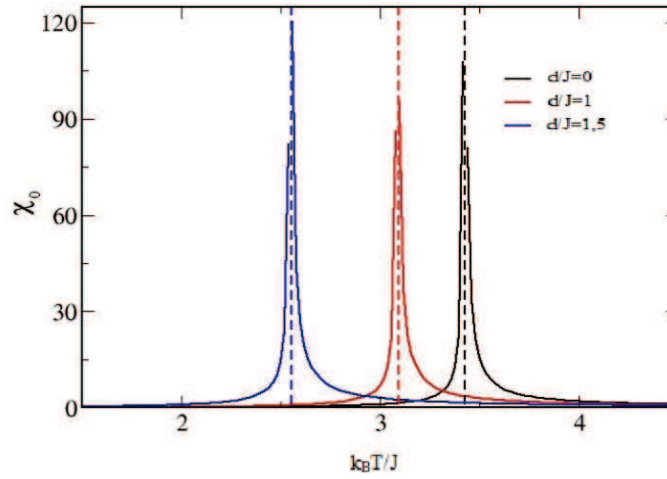


Figura 4.7 Susceptibilidade magnética em função da temperatura reduzida $k_B T/J$, do modelo Ising.

Como pode ser visualizado na Fig. (4.7), as estimativas dos valores para as temperaturas reduzidas de transição $k_B T_c/J$, são diretamente influenciadas pelo parâmetro d/J . Pois, para $d/J = 0$, o valor da temperatura reduzida de transição é $k_B T_c/J = 3,43$. Para $d/J = 1$, o correspondente valor da temperatura de transição é $k_B T_c/J = 3,09$ e para $d/J = 1,5$, temos que $k_B T_c/J = 2,55$. Esses respectivos valores da interação (DM) d/J e da estimativa para a temperatura reduzida de transição $k_B T_c/J$, demonstram que são parâmetros inversamente proporcionais.

4.2 CAMPO EFETIVO TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL

Aqui, faremos um estudo da rede cúbica simples em um cluster contendo dois spins, utilizando o modelo de Heisenberg ferromagnético, n-vetorial de spin $1/2$, na aproximação

de campo efetivo, por meio da técnica do operador diferencial.

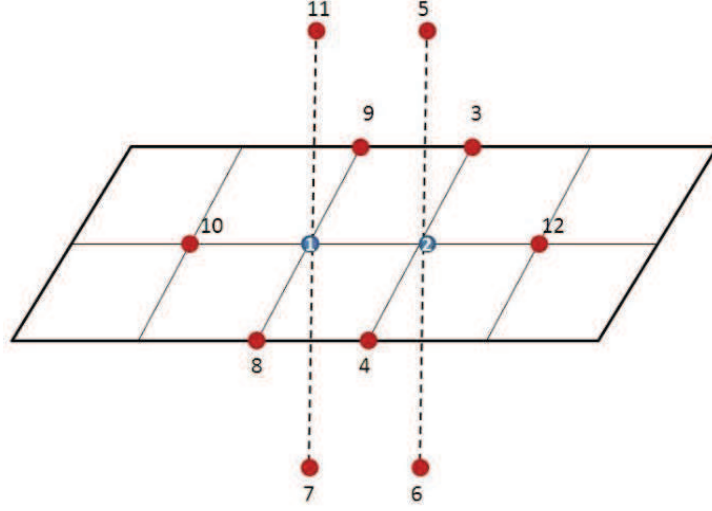


Figura 4.8 Rede cúbica simples contendo dois spins no cluster.

O hamiltoniano de Heisenberg usado nesse estudo é escrito a seguir, adicionado ao termo de campo externo:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{ij} K_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i h_i S_i . \quad (4.14)$$

A esse formalismo também serão incorporadas funções de distribuição que regem as interações entre os spins $P(K_{ij})$ e o campo externo $P(h_i)$. Os parâmetros α e p inseridos ao modelo de Heisenberg n-vetorial por essas funções de distribuição, simulam situações físicas reais encontradas nas redes cristalinas de materiais magnéticos, as quais interferem consideravelmente nas propriedades magnéticas dos mesmos. No hamiltoniano (4.14), $K_{ij} \equiv J_{ij}/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

Nesta aproximação o hamiltoniano (4.14), para o cluster da Fig.(4.8) fica:

$$-\beta\mathcal{H} = K_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j} S_1 S_j + h_1 S_1 + \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i} S_2 S_i + h_2 S_2 . \quad (4.15)$$

Chamando $a_1 = \sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j} S_j + h_1$ e $a_2 = \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i} S_i + h_2$, podemos escrever:

$$-\beta\mathcal{H} = K_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + a_1 S_1 + a_2 S_2 . \quad (4.16)$$

Na eq.(4.15) o primeiro termo representa a interação entre os spins que participam do cluster, o segundo termo a interação do sitio 1 (um) com seus primeiros vizinhos mais a ação do campo externo sobre o mesmo e o terceiro e último termo, representas as mesmas interações citadas para o sitio 1, só que agora se referindo ao sitio 2 (dois). Com a relação (4.15), vamos determinar a magnetização do sistema com os seguintes passos: a média configuracional da magnetização [40, 41] por spin num cluster contendo dois spins é dada por $m = \frac{1}{2} \langle (S_1 + S_2) \rangle$, associando a media térmica como segue, vamos obter:

$$m = \left\langle \frac{\sum_n \frac{1}{2} (S_1 + S_2) e^{-\beta \mathcal{H}_n}}{\sum_n e^{-\beta \mathcal{H}_n}} \right\rangle. \quad (4.17)$$

Agora substituindo a eq.(4.16) na eq.(4.17) , temos:

$$m = \left\langle \frac{\sum_n \frac{1}{2} (S_1 + S_2) e^{K_{12}S_1S_2 + \sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j}S_1S_j + h_1S_1 + \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i}S_2S_i + h_2S_2}}{\sum_n e^{K_{12}S_1S_2 + \sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j}S_1S_j + h_1S_1 + \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i}S_2S_i + h_2S_2}} \right\rangle, \quad (4.18)$$

considerando agora as configurações [6] possíveis para os spins do cluster S_1 e S_2 ($\uparrow\uparrow$) = 1, ($\uparrow\downarrow$) = ($\downarrow\uparrow$) = 0 e ($\downarrow\downarrow$) = -1 e efetuando as passagens algébricas, chegamos no formato da função da magnetização para o esperado dentro do formalismo da aproximação de campo efetivo:

$$m = \frac{\sinh(a_1 + a_2)}{\cosh(a_1 + a_2) + e^{-2K_{12}} \cosh(a_1 - a_2)}. \quad (4.19)$$

Perceba que a eq.(4.19) é exatamente a função $g(x, y)$ representada pela eq.(2.23) para cluster com dois spins, considerando $a_1 = \sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j}S_j + h_1$ e $a_2 = \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i}S_i + h_2$, sendo que, a mesma possui operadores de spin nos argumentos o que justifica o uso da técnica do operador diferencial [38, 6] como discutido na seção 2.4 e no Apêndice (B). Sendo assim,

$$m = \left\langle e^{(\sum_{j \neq 1}^{q-1} K_{1j}S_j + h_1 + \sum_{i \neq 2}^{q-1} K_{2i}S_i + h_2)D_v} \right\rangle g(x, y) |_{x=0, y=0}. \quad (4.20)$$

A exponencial contendo as somatórias se transforma em produtórios devido a propriedade $e^{w_1+w_2+\dots+w_n} = e^{w_1} \cdot e^{w_2} \dots e^{w_n}$, e usando a identidade (2.25) chegamos em:

$$m = \left\langle \prod_{j \neq 1}^{q-1} [\cosh(K_{1j}D_x) + S_j \sinh(K_{1j}D_x)] \times \prod_{i \neq 2}^{q-1} [\cosh(K_{2i}D_y) + S_i \sinh(K_{2i}D_y)] \right\rangle \cdot g(x, y) |_{x=h_1, y=h_2}. \quad (4.21)$$

Na expressão (4.21), $D_v = \frac{\partial}{\partial v}$ sendo $v = (x, y)$, é o operador diferencial, efetuando as operações com os produtos a seguinte sentença matemática é satisfeita:

$$2\sinh(aD_x + bD_y)g_n(x, y)|_{x=h_1, y=h_2} = g_n(a + h_1, b + h_2) - g_n(-a + h_1, -b + h_2), \quad (4.22)$$

sendo

$$g_n(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K_{12}} \cdot T_n(K_{12}) \cdot \cosh(x - y)}, \quad (4.23)$$

com $T_n(K_{12}) = \frac{1 - \tanh(\frac{n}{2} - 1)(nK_{12})}{1 + \tanh(\frac{n}{2} - 1)(nK_{12})}$, nessa relação $\tanh(\frac{n}{2} - 1)(x)$ representa a tangente hiperbólica generalizada dependente da função de Bessel [9, 39] de primeira espécie $I_n(x)$ da seguinte forma $\tanh(\frac{n}{2} - 1)(x) = \frac{I_{\frac{n}{2}}(x)}{I_{(\frac{n}{2}-1)}(x)}$. O objetivo para o uso das distribuições que regem as interações entre os sítios e a aplicação do campo externo aqui mencionadas, é a de simular possíveis configurações reais de sistemas magnéticos a respeito das efetivas contribuições desses fatores que podem flutuar pelos mais variados motivos.

A distribuição:

$$P(K_{ij}) = \frac{1}{2} [\delta(K_{ij} - K - \alpha K) + \delta(K_{ij} - K + \alpha K)], \quad (4.24)$$

está relacionada com as ligações K_{ij} , pois a depender dos valores que o parâmetro α assumir e em associação com as propriedades da função delta de Dirac [9], tem o efeito de destruir as ligações entre os sítios, ocasionando alterações no comportamento da magnetização do referido sistema. Já a distribuição para o campo magnético reduzido $h = \mu_B H / k_B T$, dada por:

$$P(h_i) = p\delta(h_i) + \frac{1-p}{2} [\delta(h_i + h) + \delta(h_i - h)], \quad (4.25)$$

sendo μ_B o magneton de Bohr e H é o campo externo governado pela distribuição através do parâmetro p e igualmente dependente das propriedades da função delta de Dirac. Como no caso da distribuição para as ligações, sendo que, para o campo é prevista pela sua função de distribuição eq.(4.25), três configurações que terão seus efeitos visualizados nos diagramas apresentados na sequência. Para inserir essa abordagem probabilística proposta pelas funções de distribuição na magnetização no contexto do presente trabalho, será efetuada uma média da eq.(4.21), como segue:

$$\bar{m} = \int dK_{ij} dh_i P(K_{ij}) P(h_i) m, \quad (4.26)$$

com esse procedimento matemático pôde-se incorporar os parâmetros α e p a função da magnetização. E ao aplicar a técnica do operador diferencial [6, 39], e considerando a invariância translacional chegamos na magnetização para o modelo n-vetorial na rede cúbica simples na aproximação de campo efetivo :

$$\bar{m} = \sum_{l=0}^4 A_{2l+1}(K, \alpha, h) m^{-2l+1}. \quad (4.27)$$

4.2.1 Diagramas de fases $k_B T_c / J \times h$ e $k_B T_c / J \times \alpha$.

Escrevendo os termos da série da eq.(4.27) que representa a magnetização, podemos estudar o comportamento da mesma no regime de transição $\bar{m} \approx 0$, nesse caso podemos reescrever a eq.(4.27) como:

$$\frac{-2}{m} = -\frac{A_1(K, \alpha, h) - 1}{A_3(K, \alpha, h)}. \quad (4.28)$$

As linhas de transição de segunda ordem nos diagramas $k_B T_c / J \times h$ e $k_B T_c / J \times \alpha$ são obtidas com as condições:

$$A_1(K, \alpha, h) = 1; \quad A_3(K, \alpha, h) < 0, \quad (4.29)$$

já os pontos tricriticos (PTC), são determinados para as condições:

$$A_1(K, \alpha, h) = 1; \quad A_3(K, \alpha, h) = 0. \quad (4.30)$$

Dando sequência, serão apresentados os resultados construídos a partir da formulação desenvolvida nesta seção.

Tabela 4.1 Localização dos pontos tricríticos T_t , h_t para valores selecionados de p e α .

	p	h_t	T_t
$\alpha = 0$	0	2,784(1)	2,390(1)
	0,1	2,994(1)	2,260(1)
	0,2	3,268(14)	2,039(1)
	0,3	3,654(1)	1,482(1)
$\alpha = 0,5$	0	2,795(1)	1,769(1)
	0,1	2,997(1)	1,610(1)
	0,2	3,249(1)	1,328(1)
	0,3	3,462(1)	0,441(1)

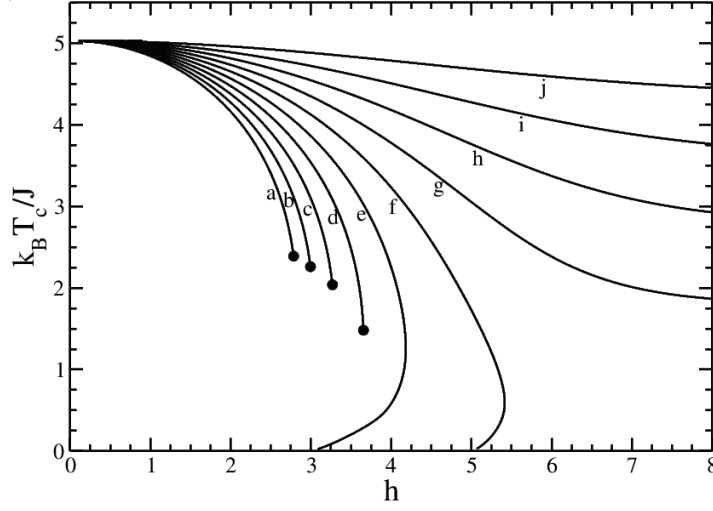


Figura 4.9 Diagrama de fases no plano $k_B T_c / J \times h$. Para (a) $p = 0,0$, (b) $p = 0,1$, (c) $p = 0,2$, (d) $p = 0,3$, (e) $p = 0,4$, (f) $p = 0,5$, (g) $p = 0,6$, (h) $p = 0,7$, (i) $p = 0,8$, (j) $p = 0,9$. Para $\alpha = 0$.

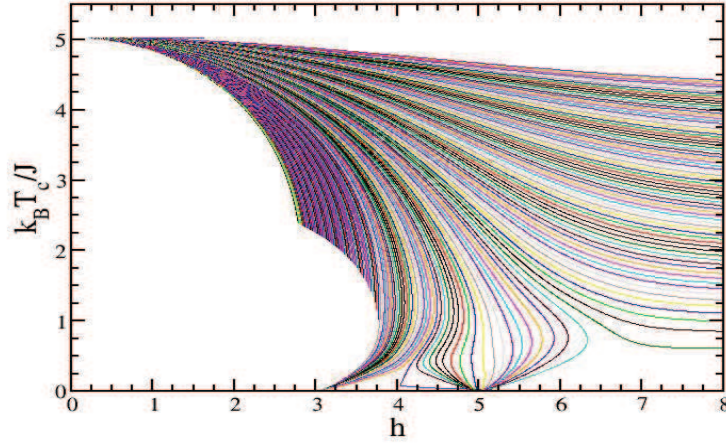


Figura 4.10 Refinamento $\alpha = 0$.

Os diagramas de fases no plano $k_B T_c / J \times h$ das figuras (4.9) e (4.10), foram construídos para um valor específico do parâmetro associado a distribuição para as ligações $P(K_{ij})$, $\alpha = 0$. E para um intervalo de valores para o parâmetro associado a distribuição trimodal para o campo externo $0 \leq p \leq 0,9$, ao passo de 0,1. Nesse caso em específico, podemos constatar na Fig.(4.9) que para os valores 0,0, 1,0, 2 e 0,3 do parâmetro p há a ocorrência de pontos tricríticos sendo o valor de $k_B T_c / J$ menor a medida que p aumenta entre $0 \leq p \leq 0,3$. Os valores de campo reduzido tricrítico h_t estão disponíveis na tabela (4.1). Outros aspectos interessante são a transição de segunda ordem e as reentrâncias para

$p = 0,4$ e $p = 0,5$ onde as linhas tocam o eixo das abscissas em h_c .

Quando os valores assumidos por p estão em $0,6 \leq p \leq 0,9$, as curvas não mais apresentam nenhum dos comportamentos (ponto tricrítico e reentrância), não existindo um campo crítico reduzido h_c para esses valores.

A Fig.(4.10), foi gerada com o objetivo de obter uma visualização refinada da tendência das linhas de convergirem nos respectivos valores do campo reduzido crítico $h_c = 3$ e $h_c = 5$.

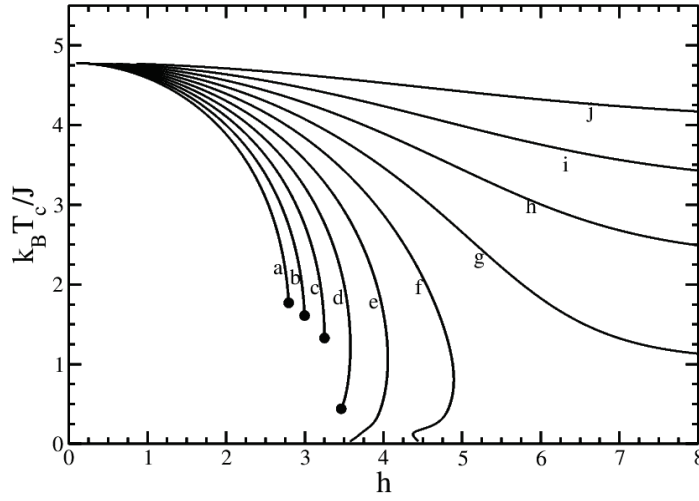


Figura 4.11 Diagrama de fases no plano $k_B T_c / J \times h$. Para (a) $p = 0,0$, (b) $p = 0,1$, (c) $p = 0,2$, (d) $p = 0,3$, (e) $p = 0,4$, (f) $p = 0,5$, (g) $p = 0,6$, (h) $p = 0,7$, (i) $p = 0,8$, (j) $p = 0,9$. Para $\alpha = 0,5$.

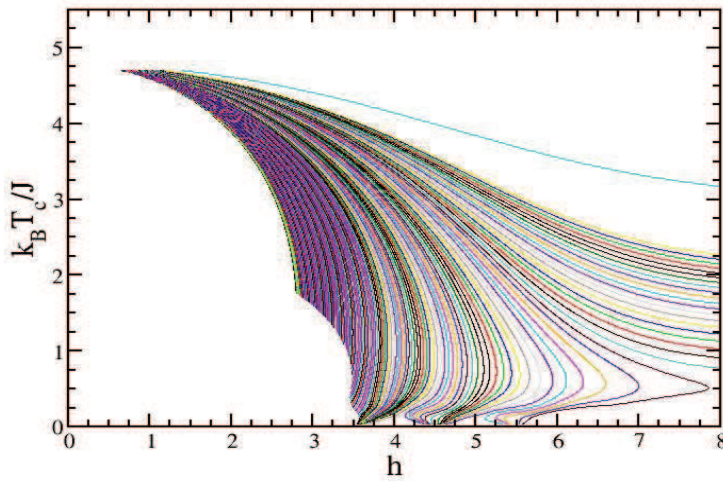


Figura 4.12 Refinamento $\alpha = 0,5$.

Para $\alpha = 0,5$, a função de distribuição $P(K_{ij})$ influenciará as interações entre os íons magnéticos bem como a distribuição do campo reduzido $P(h_i)$, os efeitos em conjunto podem ser estimados no diagrama da Fig.(4.11).

Os valores para a temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$ sofrem uma diminuição a medida que os valores para campo tricrítico aumentam, esses valores estão explicitamente disponíveis na tabela (4.1). Como no caso do diagrama anterior, também foi feito um diagrama de refinamento para $\alpha = 0,5$, Fig.(4.12) confirmando a tendência do valor de convergência do campo crítico h_c nesta configuração.

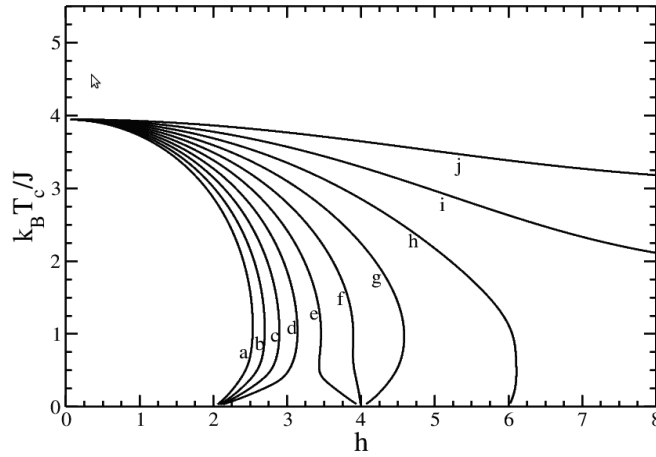


Figura 4.13 Diagrama de fases no plano $k_B T_c/J \times h$. Para (a) $p = 0,0$, (b) $p = 0,1$, (c) $p = 0,2$, (d) $p = 0,3$, (e) $p = 0,4$, (f) $p = 0,5$, (g) $p = 0,6$, (h) $p = 0,7$, (i) $p = 0,8$, (j) $p = 0,9$. Para $\alpha = 1$.

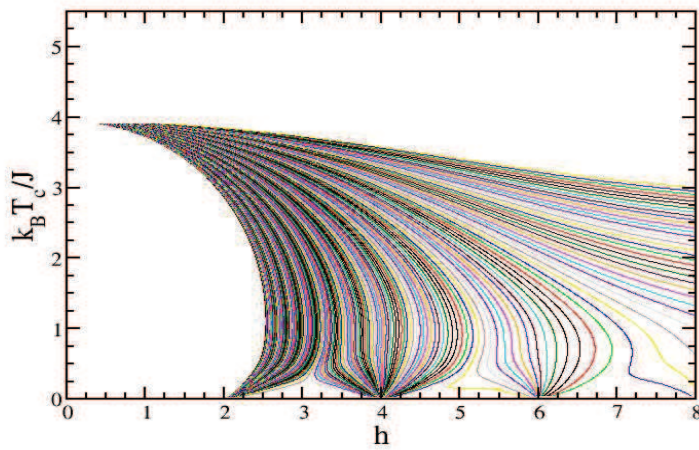


Figura 4.14 Refinamento $\alpha = 1$.

A Fig. (4.13), expressa o comportamento da temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$ como função do campo reduzido $h = \mu_B H/k_B T$ para $\alpha = 1$.

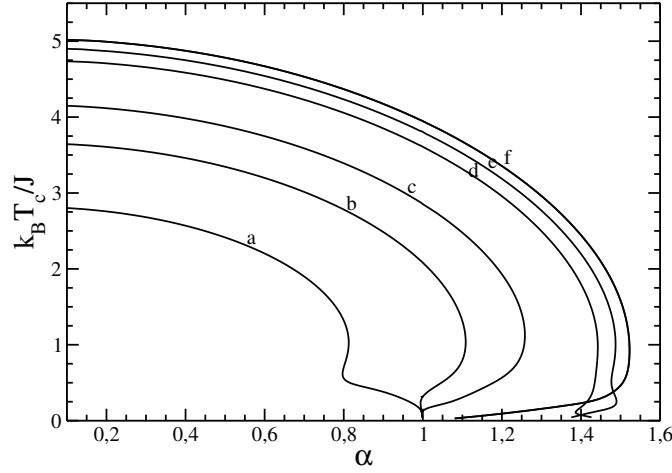


Figura 4.15 Diagrama de fase no plano $k_B T_c/J \times \alpha$. Para (a) $h = 3,5$, (b) $h = 3,0$, (c) $h = 2,5$, (d) $h = 2,0$, (e) $h = 1,5$, (f) $h = 1$.

A função de distribuição das ligações exerce máxima influência para esse valor de α , e podemos verificar que as transições exibidas são contínuas e que não existe ponto tricrítico para qualquer valor do parâmetro p . A Fig.(4.14) confirma esse comportamento, já que representa o resultado refinado para essa configuração do parâmetro α .

O diagrama de fases da Fig.(4.15) no plano $k_B T_c/J \times \alpha$, foi construído para o valor $p = 1/3$ fixo, no intervalo de $1 \leq h \leq 3,5$. Esse diagrama exhibe transições contínuas para todos os valores de h . O comportamento reentrante pode ser observado também em todas as linhas desse diagrama, e no intervalo de $1 < h < 1,7$, aparecem duplas reentrâncias, sendo que a tendência das linhas é a de convergirem para $\alpha = 1$, a medida que a temperatura reduzida $k_B T_c/J$ vai a zero.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

No presente trabalho, efetuamos a discussão a respeito das propriedades termodinâmicas e diagramas de fase do modelo de Heisenberg ferromagnético de spin $1/2$, para duas redes cristalinas distintas, utilizando para isso as aproximações de campo médio e efetivo, associadas a funções de distribuição que regem as interações entre os íons magnéticos e o campo reduzido externo, além de termos de anisotropia como o de Dzyaloshinsky-Moriya (DM).

Os resultados obtidos para a rede Kagomé utilizando o referido modelo de Heisenberg na aproximação de campo médio adicionado do termo (DM), forneceram curvas de magnetização e da susceptibilidade magnética. Um diagrama de fases no plano $k_B T_c/J \times d/J$, também foi determinado e não foram encontrados pontos tricríticos para nenhum valor de Δ , ao se impor a condição para os coeficientes $a = 1$ e $b = 0$. Uma provável explicação para a ausência do ponto tricrítico, está ligada as limitações inerentes a aproximação de campo médio, e outro fato que pode ter contribuído para a não existência do ponto tricrítico é o tipo da rede, a qual possui frustração magnética. O comportamento de todas as linhas desse diagrama $k_B T_c/J \times d/J$ Fig.(4.6), foi o de tenderem ao mesmo valor para a temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J = 2/3$, a partir de $d/J \geq 2,2$.

Os diagramas da magnetização gerados para os três valores de Δ , Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$), Heisenberg anisotrópico ($\Delta = 0,6$) e o modelo de Ising ($\Delta = 1$), apresentaram uma transição contínua e um comportamento reentrante relacionados a valores específicos da interação (DM) $d/J = 1,4$, $d/J = 1,7$ e $d/J = 1,9$ respectivamente, evidenciando também, o efeito de desordem magnética produzido pelo fator $d_0 = d/J$. Pois, à medida que o mesmo é elevado, a temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$, diminui. Para o diagrama da susceptibilidade magnética, analisamos o caso Ising ($\Delta = 1$). Neste diagrama, também foi possível atestar o efeito de desordem que o parâmetro (DM) causa ao sistema, pois a medida que d/J aumenta o valor de $k_B T_c/J$, diminuiu como visto na subseção 4.1.3.

Para o caso do modelo de Heisenberg de spin $1/2$ na aproximação de campo efetivo desenvolvida, foi possível visualizar através dos diagramas $k_B T_c/J \times h$ e $k_B T_c/J \times \alpha$ os efeitos do sistema sob a influência da variação dos parâmetros da distribuição para a

ligação, e da distribuição trimodal para o campo externo aqui empregados. A distribuição trimodal do campo não gerou pontos tricríticos. Quando p assume o valor $1/3$ não são demonstrados pontos críticos para qualquer valor do parâmetro α . Em contra partida, com $\alpha = 1$, o diagrama não apresenta ponto tricrítico para nenhum valor do parâmetro p . Tais comportamentos nos levaram a concluir que sistemas desordenados estão sob a influência de muitos fatores aleatórios e como consequência não possuem ponto tricrítico.

Nossas perspectivas para trabalhos posteriores, utilizando modelos hamiltonianos de spins nas aproximações de campo medio e efetivo, com as funções de distribuição e termos anisotrópicos abordadas neste texto, seguem com a intenção de ampliar os valores de spin e do cluster, afim de modelar sistemas frustrados e desordenados reais, além de produzir resultados teóricos para redes idealizadas com melhor aproximação. Dentro desse seguimento, também serão utilizados métodos computacionais como o de Monte Carlo para realizar comparações com os resultados analíticos a fim de dar mais confiabilidade aos dados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Santos-Filho, A. Propriedades magnéticas do Modelo de Hubbard Clássico. Dissertação (Mestrado)-UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE-DEPARTAMENTO DE FÍSICA,(2002).
- [2] EISBERG,R. RESNICK,R. Física Quântica Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Rio de Janeiro: Elsevier, (1979).
- [3] REICHL,L.E. A Modern Course in Statistical Physics.New York: Wiley-Interscience, (1998).
- [4] Voigt, A. Richter, J. Numerical Study of Weak Ferromagnetism in 2D J_1 - J_2 Heisenberg Model with Dzyaloshinskii-Moriya Interaction Acta Physica Polonica-Series A General Physics, Warszawa: Panstwowe Wydawnictwo Naukowe, 1970-, 91, 371-376,(1997).
- [5] J. Ricardo de Sousa; F. Lacerda; I.P. Fittipaldi, Thermodynamic Properties of the Anisotropic Heisenberg Model with Dzyaloshinsky-Moriya Interaction, Physica A, 258, pp.221-229, (1998).
- [6] ALBUQUERQUE,D.F.de. Transições de fase em sistemas de Ising com interação competitivas pelo método de grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo. Dissertação(Mestrado)-UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO-DEPARTAMENTO DE FÍSICA,(1991).
- [7] Santos-Filho,J.B. Estudo do modelo de Ising com interações mistas através de simulação Monte Carlo e teoria de campo efetivo.
- [8] A. Aharony, Tricritical points in systems with random fields, Phys.Rev.B 18, 3318 (1978).
- [9] Arfken,G.B. Mathematical Methods for Physicists. San Diego,California.Academic Press, (1995).

- [10] KITTEL, C. Introdução à Física do Estado Sólido. Rio de Janeiro: LTC, (2006).
- [11] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Filadélfia: Saunders College.
- [12] Matan, K.; Bartlett, B.; Helton, J.; Sikolenko, V.; Mat'aš, S.; Prokeš, K.; Chen, Y.; Lynn, J.; Grohol, D.; Sato, T. others Dzyaloshinskii-Moriya interaction and spin reorientation transition in the frustrated kagome lattice antiferromagnet Physical Review B, APS, (2011), 83, 214406
- [13] Daniel Grohol. et al. "Spin Chirality on a two-dimensional Frustrated Lattice." *Nature Materials*, vol. 4 April (2005).
- [14] J.J.Sakurai,Jim Napolitano, Mecânica Quântica Moderna,Porto Alegre, Bookman,(2013).
- [15] Landau,Lifshitz, Statistical Physics,Part 1,3^a ed.,Institute of Physical Problems, USSR Acedemy of Sciences, Moscow,Oxford,(1980), Vol.5.
- [16] Landau,Lifshitz, Statistical Physics,Part 2,3^a ed.,Institute of Physical Problems, USSR Acedemy of Sciences, Moscow,Oxford,(1980), Vol.5.
- [17] SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística. São Paulo: edusp, (2008).
- [18] YEOMANS, J. M. Statistical Mechanics of Phase Transitions. [S.l.]: Oxford University Press, (1992).
- [19] STANLEY, H. E. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. [S.l.]: ClarendonPress, (1971).
- [20] Metropolis,N. The Beginning of the Monte Carlo. Los Alamos Science,special issue, n.15,P.125-130,(1987).
- [21] Almeida,F.A.G. Magnetismo Localizado com Distribuição Heterogênea de Elétons na rede . DISSERTAÇÃO (MESTRADO)-UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE-DEPARTAMENTO DE FÍSICA ,(2006).
- [22] Herbert B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. 2^a ed. ,[S.I.], (1985).
- [23] I. Dzyaloshinsky, A Thermodynamic Theory of "Weak" Ferromagnetism of Antiferromagnetics, F. Phys. Solids Pergamon Press, v.4, pp. 241-255, (1958).

- [24] Tôru Moriya, New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction, Phys. Rev. Letters, v.4, n.5, pp. 228-230, (1960).
- [25] J. Ricardo de Sousa; Douglas F. de Albuquerque; I.P. Fittipaldi, Tricritical Behavior of a Heisenberg Model with Dzyaloshinski-Moriya Interaction, Phys. Letters A, 191, pp. 275-278, (1994).
- [26] Sousa, J. R. Modelos Decorados com Frustração Magnética: Aplicação a Supercondutores de Altas Temperatura. Tese (Doutorado)-UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO-DEPARTAMENTO DE FÍSICA, (1994).
- [27] Azevedo, J. Menezes. Modelo de Ising Frustrado e Aleatoriamente Decorados com Interações de Primeiros e Segundos Vizinhos com Campo Magnético. Dissertação (Mestrado)- UNIVERSIDADE FEDERAL DE RORAIMA- DEPARTAMENTO DE FÍSICA, (2012).
- [28] J. Ricardo de Sousa; F. Lacerda; I.P. Fittipaldi, Thermal Behavior of a Heisenberg Model with Interaction, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, pp. 1501-1502, (1995).
- [29] GUIMARÃES, A. P. Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos. São Paulo: edusp, (2009).
- [30] Guang-Hou Sun; Xiang-Mu Kong, Phase Diagram and Tricritical Behavior of the Spin-1 Heisenberg Model with Dzyaloshinskii-Moriya Interactions, Physica A, 370, pp. 585-590, (2006).
- [31] D. C. Carvalho; J. A. Plascak; L. M. Castro, Quantum Spin-1 Anisotropic Ferromagnetic Heisenberg Model in a Crystal Field: A Variational approach, Physical Review E 88, pp. 032111, (2013).
- [32] C. Domb, in: C. Domb, M.S. Green (Eds.), Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 3, Academic Press, London, (1974).
- [33] A.P. Ramirez, Annu. Rev. Mater. Sci. 24, 453 (1994).
- [34] A.P. Ramirez, G.P. Espinosa, and A. S. Cooper, Phys. Rev. Lett. 64, 2070 (1990).
- [35] K. Morita, M. Yano, T. Ono, H. Tanaka, K. Fujii, H. Uekusa, Y. Narumi, and K. Kindo, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 043707 (2008).

- [36] D. Grohol, D. G. Nocera, and D. Papoutsakis, Phys. Rev. B 67, 064401 (2003).
- [37] B. M. Bartlett and D. G. Nocera, J. Am. Chem. Soc. 127, 8985 (2005).
- [38] F.C.SÁ Barreto;I.P.Fitipaldi, A Simple Derivation of the Thermodynamical Properties of the One-Dimensional Ising Model, Revista Brasileira de Física, Vol. 11, nº 3, (1981).
- [39] Douglas F. de Albuquerque;Sandro Roberto L. Alves; Alberto S. de Arruda,Critical behavior in a random field classical Heisenberg model for amorphous systems, Physics Letters A,Vol. 346,pp 128-132, (2005).
- [40] D.F. de Albuquerque; S.R.L. Alves; A.S.de Arruda; N.O. Moreno, Critical behavior in a random field classical XY model for amorphous systems, Physica B,Vol.384, pp.212-214,(2006).
- [41] D.C. de Oliveira; A.A.P.da Silva; Douglas F. de Albuquerque; Alberto S. de Arruda,Critical behavior of an Ising metamagnet in uniform and random fields, Physica A,Vol.386, pp.205-211,(2007).
- [42] A.Weizenmann; Maurício Godoy;A.S. de Arruda;Douglas F. de Albuquerque; N.O.Moreno, Phase diagram and tricritical behavior of an Ising metamagnet model in a trimodal random field,Physica B,Vol.398,pp.297-300,(2007).
- [43] N.G.Fytas;P.E.Theodorakis;I.Georgiou, Universality aspects of the trimodal random-field Ising model,The European Physical Journal B, (2012).
- [44] A.Santos-Filho,D.F.de Albuquerque,J.B.Santos-Filho,T.S.Araujo Batista, Phase diagram of the classical Heisenberg model in a trimodal random field distribution, Physica A,Vol.461,pp.133-139,(2016).

APÊNDICE A

IDENTIDADE DE CALLEN

Para explicar em mais detalhes a aproximação de campo efetivo, e bem como a técnica do operador diferencial, desenvolveremos a partir de agora os alicerces desse método partindo do modelo de Ising unidimensional de spin 1/2 em um campo externo, como segue abaixo:

$$\mathcal{H} = \frac{-J}{2} \sum_{i,\delta} \sigma_i \sigma_{i+\delta} - h \sum_i \sigma_i . \quad (\text{A.1})$$

O primeiro termo representa a soma das interações entre os vizinhos mais próximos de 1 a N , sendo J a interação de troca e $\sigma_i = \pm 1$. O segundo termo é a interação do campo externo com os spins da rede. A magnetização é dada por $m = \langle \sigma_i \rangle$. Considerando a figura abaixo vamos desenvolver o trabalho algébrico.



Figura A.1 Rede unidimensional.

O valor esperado (médio) da variável de spin é dada por:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}}}{\mathbb{Z}}, \quad (\text{A.2})$$

sendo $\mathbb{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$ e ($\text{Tr} = \text{traço}$) soma das médias de todos os estados do sistema. Reescrevendo o hamiltoniano de Ising acima em duas partes como \mathcal{H}_i (abrange todas as interações dos spins da rede nos sítios i) e \mathcal{H}' (a parte que não depende dos sítios i).

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}' , \quad (\text{A.3})$$

com

$$\mathcal{H} = -J \sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} - h \sigma_i , \quad (\text{A.4})$$

que podemos reescrever como $\mathcal{H} = -\sigma_i (J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} + h)$, chamando $E_i = (J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} + h)$, temos que $\mathcal{H}_i = -\sigma_i E_i$. Observe que E_i é o campo local sobre o sítio i . Note que E_i é uma função de variáveis de spin da vizinhança não do sítio i . Supondo que as variáveis de spin comutem, isto é:

$$[\sigma_i, \sigma_{\delta}] = 0. \quad (\text{A.5})$$

A comutatividade dos operadores desenvolve um papel fundamental na determinação da identidade de Callen. Vamos escrever o traço como $Tr = \prod_{k=1}^N tr(k)$ para $(k \neq i = 1)$, segue $Tr = \left(\prod_{k \neq i=1}^N tr(k) \right) tr(i)$, agora chamando $\prod_{k \neq i=1}^N tr(k) = T'r$, temos:

$$Tr = T'r Tr(i). \quad (\text{A.6})$$

Aqui, $Tr(k) = \sum_{\sigma_k=-1}^{+1}$ é o traço para os estados associados com as variáveis no sítio k .

Podemos escrever $\langle \sigma_i \rangle = \frac{Tr \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}}}{\mathbb{Z}}$, usando as eq.(3), eq.(5) e eq.(6), como na sequência:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}', [\mathcal{H}_i, \mathcal{H}'] = [\mathcal{H}_i, \mathcal{H} - \mathcal{H}_i] = [\mathcal{H}_i, \mathcal{H}] = 0 \text{ e } Tr = T'r Tr(i).$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r Tr(i) \sigma_i \cdot e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \mathcal{H}')} \right\},$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r Tr(i) \sigma_i \cdot e^{-\beta \mathcal{H}_i} \cdot e^{-\beta \mathcal{H}'} \right\},$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r e^{-\beta \mathcal{H}'} \left(Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} \right) \right\}.$$

Inserindo o termo $\frac{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} = 1$, temos:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r e^{-\beta \mathcal{H}'} \left(Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} \right) \right\} \cdot \frac{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}}$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r e^{-\beta \mathcal{H}'} \cdot \left(Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i} \right) \left(\frac{Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right) \right\},$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ T'r Tr(i) e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \mathcal{H}')} \left(\frac{Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right) \right\},$$

sendo $\mathcal{H}_i + \mathcal{H}' = \mathcal{H}$ e $T'r Tr(i) = Tr$, temos que $T'r Tr(i) e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \mathcal{H}')} = Tr e^{-\beta \mathcal{H}}$, logo:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ Tr e^{-\beta \mathcal{H}} \left(\frac{Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right) \right\}. \quad (\text{A.7})$$

Usando $\mathcal{H}_i = -J\sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{\delta} - h\sigma_i$,

$\mathcal{H}_i = -\sigma_i (J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} + h)$, chamando $J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} + h = E_i$,

$\mathcal{H}_i = -\sigma_i E_i$ é a eq.(4) .

E lembrando que $\sigma_i = \pm 1$, o parêntese da eq.(7) , fica:

numerador:

$$Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} = Tr(i) \sigma_i e^{-\beta(-\sigma_i E_i)} = Tr(i) \sigma_i e^{\beta \sigma_i E_i} = e^{\beta E_i} - e^{-\beta E_i} ,$$

denominador:

$$Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i} = Tr(i) e^{-\beta(-\sigma_i E_i)} = Tr(i) e^{\beta \sigma_i E_i} = e^{\beta E_i} + e^{-\beta E_i} ,$$

$$\frac{Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} = \frac{e^{\beta E_i} - e^{-\beta E_i}}{e^{\beta E_i} + e^{-\beta E_i}} = \tanh(\beta E_i) .$$

Portanto,

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ Tr e^{-\beta \mathcal{H}} \cdot \left(\frac{Tr(i) \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Tr(i) e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right) \right\} ,$$

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathbb{Z}} \left\{ Tr e^{-\beta \mathcal{H}} \cdot \tanh(\beta E_i) \right\} ,$$

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{Tr(e^{-\beta \mathcal{H}} \tanh(\beta E_i))}{\mathbb{Z}} ,$$

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle . \quad (\text{A.8})$$

A relação acima é conhecida como a identidade de Callen.

APÊNDICE B

OPERADOR DIFERENCIAL EXPONENCIAL

A técnica do operador diferencial é utilizada na abordagem da aproximação de campo efetivo, devido a esse formalismo fornecer funções que possuem operadores de spins em seus argumentos. Sendo assim, as propriedades do operador diferencial são aplicadas para remover essa dificuldade algébrica. A discussão a seguir demonstrará a técnica. Sendo D um operador diferencial $\frac{\partial}{\partial x}$ e $e^{\alpha D}$ sendo um operador definido como:

$$e^{\alpha D} = 1 + \alpha D + \frac{\alpha^2 D^2}{2!} + \frac{\alpha^3 D^3}{3!} + \cdots, \quad (\text{B.1})$$

sendo α um parâmetro qualquer. Aplicando em uma função arbitrária $f(x)$ é fácil ver que:

$$e^{\alpha D} f(x) = f(x + \alpha). \quad (\text{B.2})$$

Como exemplo, vamos aplicar $e^{\alpha D}$ na função $\cos(x)$.

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \left(1 + \alpha D + \frac{\alpha^2 D^2}{2!} + \frac{\alpha^3 D^3}{3!} + \cdots\right) \cos(x),$$

sendo $D = \frac{\partial}{\partial x}$,

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \left(1 + \alpha \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\alpha^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\alpha^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\alpha^4}{4!} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \cdots\right) \cos(x),$$

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \cos(x) - \alpha \sin(x) - \frac{\alpha^2}{2!} \cos(x) + \frac{\alpha^3}{3!} \sin(x) + \frac{\alpha^4}{4!} \cos(x) + \cdots,$$

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \cos(x) \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \cdots\right) + \sin(x) \left(-\alpha + \frac{\alpha^3}{3!} + \cdots\right).$$

Lembrando que:

$$\sin(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots,$$

e

$$\cos(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots ,$$

logo,

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \cos(x) \cos(\alpha) - \sin(x) \sin(\alpha) .$$

Pela relação trigonométrica $\cos(\alpha \pm \beta) = \cos(\alpha) \cos(\beta) \mp \sin(\alpha) \sin(\beta)$, então:

$$e^{\alpha D} \cos(x) = \cos(x + \alpha) , \quad (\text{B.3})$$

como queríamos demonstrar. Agora, aplicando $e^{\alpha D} f(x) = f(x + \alpha)$, na identidade de Callen demonstrada no apêndice A, $\langle \alpha_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle$, fica:

$$\langle \alpha_i \rangle = \langle e^{(\beta E_i)D} \tanh(x) |_{x=0} \rangle = \langle e^{(\beta E_i)D} \rangle \cdot \tanh(x) |_{x=0} .$$

Retiramos $\tanh(x) |_{x=0}$ da média porque é um número e não tem qualquer operador de spin. O valor de x deve ser tomado igual a zero ($x = 0$), depois de efetuadas todas as operações .

Usando a relação $\mathcal{H}_i = -J\sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{\delta} - h\sigma_i$, que representa o campo local sobre o sítio i , $E_i = -J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} - h$, temos:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta} + \beta h)D} \right\rangle \tanh(x) |_{x=0} ,$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} \cdot e^{(\beta h)D} \right\rangle \tanh(x) |_{x=0} ,$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} \right\rangle \tanh(x + \beta h) |_{x=0} .$$

No último passo acima, foi aplicada a propriedade $e^{\alpha D} f(x) = f(x + \alpha)$ para a parte com dependência do campo externo h . Podemos reescrever $e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D}$ como $\prod_{\delta} e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D}$ da seguinte maneira:

$$e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} = e^{\beta J (\sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} = e^{\beta J (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \dots + \sigma_n)D} ,$$

$$e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} = e^{(\beta J \sigma_1)D} \cdot e^{(\beta J \sigma_2)D} \cdot \dots \cdot e^{(\beta J \sigma_n)D} ,$$

$$e^{(\beta J \sum_{\delta} \sigma_{\delta})D} = \prod_{\delta} e^{(\beta J \sigma_{\delta})D} .$$

Sendo assim, podemos escrever:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \prod_{\delta} e^{(\beta J \sigma_{\delta})D} \right\rangle \tanh(x + \beta h) |_{x=0} . \quad (\text{B.4})$$

Como os operadores de spin de Ising podem assumir dois valores $\sigma \pm 1$, podemos notar a seguinte propriedade $\sigma_i^2 = \sigma_i^4 = \sigma_i^6 = \dots = 1$ e $\sigma_i = \sigma_i^3 = \sigma_i^5 = \dots = \sigma_i^{2n+1}$ para qualquer α_i ,

$$e^{\lambda \sigma_i} = 1 + \lambda \sigma_i + \frac{\lambda^2}{2!} \sigma_i^2 + \frac{\lambda^3}{3!} \sigma_i^3 + \frac{\lambda^4}{4!} \sigma_i^4 + \dots ,$$

com

$$(1)^{2n} = (-1)^{2n} = 1 ,$$

$$\{(1)^{2n+1} = 1; \quad (-1)^{2n+1} = -1\} \Rightarrow (\sigma_i)^{2n+1} = \sigma_i .$$

Logo,

$$e^{\lambda \sigma_i} = 1 + \lambda \sigma_i + \frac{\lambda^2}{2!} + \frac{\lambda^3}{3!} \sigma_i + \frac{\lambda^4}{4!} + \frac{\lambda^5}{5!} \sigma_i + \dots ,$$

$$e^{\lambda \sigma_i} = \left(1 + \frac{\lambda^2}{2!} + \frac{\lambda^4}{4!} + \dots\right) + \sigma_i \left(\lambda + \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} + \dots\right) .$$

Lembrando que:

$$\cosh(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} x^{2n} = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \dots ,$$

$$\sinh(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} x^{2n+1} = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots .$$

Portanto,

$$e^{\lambda\sigma_i} = \cosh(\lambda) + \sigma_i \sinh(\lambda) . \quad (\text{B.5})$$

Agora substituindo a relação (B5) em (B4), temos :

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \prod_{\delta} [\cosh(\beta JD) + \sigma_{\delta} \sinh(\beta JD)] \right\rangle \tanh(x + \beta h) |_{x=0} . \quad (\text{B.6})$$

O resultado acima é exato e é válido para qualquer estrutura de rede e de spin 1/2 do modelo de Ising com interações de primeiros vizinhos.

APÊNDICE C

MAGNETIZAÇÃO

Dando prosseguimento a discussão do formalismo da aproximação de campo efetivo, vamos agora determinar a função da magnetização para uma rede linear com um cluster contendo apenas um íon magnético, podendo δ assumir somente dois valores ± 1 .

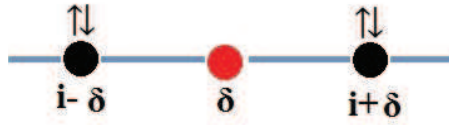


Figura C.1 Magnetização rede unidimensional.

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \prod_{\delta} [\cosh(\beta JD) + \sigma_{i+\delta} \sinh(\beta JD)] \tanh(x + \beta h) \big|_{x=0} \rangle ,$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle [\cosh(\beta JD) + \sigma_{i+1} \sinh(\beta JD)] [\cosh(\beta JD) + \sigma_{i-1} \sinh(\beta JD)] \times \tanh(x + \beta h) \big|_{x=0} \rangle ,$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \cosh^2(\beta JD) + \sigma_{i-1} \cosh(\beta JD) \sinh(\beta JD) + \sigma_{i+1} \cosh(\beta JD) \sinh(\beta JD) + (\sigma_{i+1})(\sigma_{i-1}) \sinh^2(\beta JD) \cdot \tanh(x + \beta h) \big|_{x=0} \rangle .$$

Reescrevendo as funções hiperbólicas como $\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$, $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$ e $\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$, vamos substituir na equação imediatamente acima e efetuando as aplicações do operador exponencial e na sequência tomando $x = 0$, temos:

$$a = \frac{1}{2[1 - f^2(2\beta J)f^2(\beta h)]} \{2f(\beta h) - f^2(2\beta J)f(\beta h)[1 + f^2(\beta h)]\} ,$$

$$b = \frac{1}{2[1 - f^2(2\beta J)f^2(\beta h)]} \{f(2\beta J)[1 - f^2(\beta h)]\} ,$$

$$c = \frac{1}{2[1 - f^2(2\beta J)f^2(\beta h)]} \{f^2(2\beta J)f(\beta h)[f^2(\beta h) - 1]\} ,$$

sendo $\tanh(2\beta J) = f(2\beta J)$ e $\tanh(\beta h) = f(\beta h)$.

Após as sucessivas aplicações dos operadores sobre $\tanh(x + \beta h) |_{x=0}$, as passagens matemáticas não são de grande complexidade, mas por outro lado são muito extensas e por isso foram omitidas.

A magnetização ficou escrita em função dos coeficientes a , b , e c .

$$\langle \sigma_i \rangle = a + b (\langle \sigma_{i+1} \rangle + \langle \sigma_{i-1} \rangle) + c \langle \sigma_{i+1} \cdot \sigma_{i-1} \rangle. \quad (\text{C.1})$$

Para a configuração de campo externo nulo ($h = 0$), temos que:

$$a = 0,$$

$$b = \frac{1}{2} f(2\beta J) = \frac{1}{2} \tanh(2\beta J) = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{2J}{k_B T}\right),$$

$$c = 0.$$

A magnetização fica:

$$m(T, h = 0) = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{2} \tanh(2\beta J). \quad (\text{C.2})$$

A relação acima para a magnetização, com ($h = 0$), mostra que uma transição de fase ($m = 0$) deve ocorrer somente em $T = 0$, o que implica em ($\beta \rightarrow \infty$).

APÊNDICE D

COEFICIENTES DA EXPANSÃO

Seguem abaixo os coeficientes a , b e c da expansão em série da função da magnetização eq.(4.9), em torno de $m = 0$. Sendo que $\theta = (1 - \Delta)$, $\Theta = [d^2 + J^2(1 - \Delta)^2]$ e $K = \beta J$. Por questões de notação, podemos considerar aqui $d = d_0 = d/J$, como o parâmetro (DM) adimensional e t é a temperatura reduzida.

$$a = \frac{1}{3} \frac{(q-2)J \left(9e^{3K} + e^{-\frac{Kt+4\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}} - \frac{Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) \right)}{t \left(e^{3K} + e^{-\frac{Kt+4\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}} - \frac{Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) \right)}$$

$$b = \frac{1}{9} \left((q-2)^3 J^3 \left(-81e^{6K} + 14e^{-\frac{2(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} + 28e^{-\frac{2(Kt+\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) \right. \right. \\ - e^{-\frac{2(Kt+4\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} - 4e^{-\frac{2(Kt+\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) \\ - 4e^{-\frac{2(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right)^2 \right) \Bigg/ \left(t^3 \left(e^{6K} + 2e^{-\frac{2(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \right. \right. \\ + 4e^{-\frac{2(Kt+\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) + e^{-\frac{2(Kt+4\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \\ + 4e^{-\frac{2(Kt+\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right) \\ + 4e^{-\frac{2(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos\left(\frac{1}{3}\arctan\left(\frac{J\theta}{d}\right)\right)}{t}\right)^2 \right) \right)$$

$$\begin{aligned}
c = & \frac{2}{45} \left((q-2)^5 J^5 \left(729 e^{9K} + e^{-\frac{3(Kt+4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d})))}{t}} + 44e^{\frac{Kt-2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) \right. \right. \\
& - 221e^{\frac{5Kt-4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} + 11e^{\frac{Kt-8\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} + 8e^{\frac{3(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) \\
& - 442e^{\frac{5Kt+2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) \\
& + 44e^{\frac{Kt+4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right)^2 \\
& + 6e^{\frac{3(Kt+2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) + 12e^{-3K} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right)^2 \Bigg) \Bigg/ \left(t^5 \left(e^{9K} \right. \right. \\
& + 3e^{\frac{5Kt-4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} + 6e^{\frac{5Kt+2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) + 3e^{\frac{Kt-8\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \\
& + 12e^{\frac{Kt-2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) \\
& + 12e^{\frac{Kt+4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right)^2 + e^{\frac{3(Kt+4\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \\
& + 6e^{\frac{3(Kt+2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right) + 12e^{-3K} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right)^2 \\
& \left. \left. + 8e^{\frac{3(Kt-2\sqrt{\Theta}\sin(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}} \cosh\left(\frac{2\sqrt{\Theta}\sqrt{3}\cos(\frac{1}{3}\arctan(\frac{J\Theta}{d}))}{t}\right)^3 \right) \right)
\end{aligned}$$

APÊNDICE E

TRABALHO PUBLICADO



Minireview

Phase diagram of the classical Heisenberg model in a trimodal random field distribution



A. Santos-Filho^{a,b,*}, D.F. de Albuquerque^c, J.B. Santos-Filho^d,
T.S. Araujo Batista^e

^a Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão, SE, Brazil

^b Departamento de Química, Faculdade Pio Décimo, Aracaju, SE, Brazil

^c Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000 São Cristóvão, SE, Brazil

^d Departamento de Informática, Instituto Federal de Sergipe, 49100-000 São Cristóvão, SE, Brazil

^e Departamento de Química, Instituto Federal de Sergipe, 49055-260 Aracaju, SE, Brazil

HIGHLIGHTS

- The reentrant phenomena depend on the trimodal distribution of the random field.
- Phase diagram in the plane T versus α exhibits double reentrant.
- An amorphous classical Heisenberg model (RFHM) with disorderly bond site model was investigated.
- The nature of the phase transition in the RFHM was investigated, as a function of the connectivity.
- Effective field theory (EFT) using clusters of two spins.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 20 October 2015

Received in revised form 26 April 2016

Available online 24 May 2016

Keywords:

Classical Heisenberg model

Effective field theory

Random field

Phase transition diagram

ABSTRACT

The classical spin 1/2 Heisenberg model on a simple cubic lattice, with fluctuating bond interactions between nearest neighbors and in the presence of a random magnetic field, is investigated by effective field theory based on two-spin cluster. The random field is drawn from the asymmetric and anisotropic trimodal probability distribution. The fluctuating bond is extracted from the symmetric and anisotropic bimodal probability. We estimate the transition temperatures, and the phase diagram in the T_c - h , T_c - p and T_c - α planes. We observe that the temperature of the tricritical point decreases with the increase of disorder in exchange interactions until the system ceases to display tricritical behavior. The disorder of the interactions and reentrant phenomena depends on the trimodal distribution of the random field.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

Contents

1. Introduction.....	134
2. Model and calculations.....	134
3. Results.....	135
4. Conclusion.....	138
References.....	138

* Corresponding author at: Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão, SE, Brazil.

E-mail address: adelino.cesad@gmail.com (A. Santos-Filho).